



ELTE
EÖTVÖS LORÁND
UNIVERSITY

NAGYENTRÓPIÁS ÖTVÖZETEK BELSŐ
FESZÜLTÉGTERÉNEK KARAKTERIZÁLÁSA
MESTERSÉGES INTELLIGENCIA
SEGÍTSÉGÉVEL

Lukács Kolos
Fizika MSc

Témavezetők:
Berta Dénes és Dr. Ispánovity Péter Dusán

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Fizikai és Csillagászati Intézet
Anyagfizikai Tanszék
2024

Kivonat

A világszerte aktívan kutatott nagyentrópiás ötvözetek (High Entropy Alloys – HEA) sokkomponensű ötvözetek, melyekben a különböző atomok véletlenszerű elhelyezkedése jelentős torzulásokat eredményez a kristályszerkezetben. A plasztikus deformációt létrehozó diszlokációk jellegzetes, úgynevezett „stick-slip” mozgást végeznek, amely széles körben tanulmányozható, többek között transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) segítségével, mellyel élő felvétel készíthető a diszlokációk mozgásáról. A rácstorzulásokból következő intermittens diszlokációdinamika következtében ezen anyagok esetében a nagy keménység kiemelkedő képlékenységgel párosul, amely rendkívül előnyös az ipari felhasználás szempontjából.

Célunk egy diszlokációvonal formájának vizsgálatán alapuló módszer kidolgozása, amellyel a HEA-k atomi szerkezetéhez köthető belső feszültségtér karakterizálható.

Az ötvözet belső struktúrája és az ebből következő jellegzetes, fraktálszerű diszlokációalak közti kapcsolat modellezésének komplexitása mesterséges intelligencia (MI) alkalmazását teszi szükségessé. Kutatásunk során diszlokációdinamikai szimulációkból származó adatokat használunk, melyek egy diszlokációvonal heterogén feszültségtérben történő mozgását írják le. Célkitűzésünk ezen feszültségtér statisztikai jellemzőinek megjósolása hagyományos gépi tanulási módszerek segítségével a diszlokációvonal alakjának jellemzői alapján. Számos MI algoritmust alkalmaztunk és különböző reprezentációkat teszteltünk a diszlokációalak jellemzésére. Megfelelő algoritmus és reprezentáció választással a belső feszültségtér szórását igen magas $R^2 \simeq 0.9$ -es determinációs együtthatóval tudjuk megjósolni.

Végcélunk fejlesztés alatt álló módszerünk jövőbeli felhasználása valós, kísérleti TEM felvételeken történő alkalmazása, amivel eljárásunk tényleges analitikai eszközzé válhat, amellyel HEA-k belső feszültségviszonyaira következtethetünk majd.

Tartalomjegyzék

Kivonat	1
1. Bevezető	3
2. Diszlokációk komplex ötvözetekben	5
2.1. Kristályszerkezet és kristályhibák	5
2.2. Összetett kristályötvözetek	7
3. Mesterséges Intelligencia	9
3.1. Lineáris regresszor	10
3.2. Legközelebbi szomszédok módszere	11
3.3. Döntési fákra alapuló regresszorok	11
3.3.1. Véletlen erdő regresszor	13
3.3.2. Gradiens gyorsító regresszor	13
4. Diszlokáció Depinning Szimulátor	15
4.1. A szimulátor modellje	15
4.2. Szimulátor paraméterei	16
4.3. Kimeneti fájlok	17
5. Metodika	18
5.1. Szimulált adatsor	18
5.2. Diszlokáció vonal jellemző reprezentációk	19
5.3. Modell kiértékelés	21
5.4. Jellemző-analízis	22
6. Eredmények	26
6.1. Egymást követő diszlokációvonalak kvázi átlagolása	28
6.2. Jellemző analízis	31
6.2.1. Empirikus jellemzők	32
6.2.2. Fourier-jellemzők	33
7. Eredmények összefoglalása és továbblépési lehetőségek	36

1. Bevezető

A történelem során az anyagoknak és különösen a fémeknek kutatása nagy hatással volt az emberiség fejlődésére. A fémek formálásának és használatának kezdetekor nagy előnyt nyújtott használóinak a gazdasági feladatok elvégzésében, majd jóval később a fémek egyedülálló ellenállóképességének és keménységének továbbfejlesztése érdekében ötvözték őket más anyagokkal. Ezen tipikusan kétkomponensű ötvözetek voltak, melyek kis koncentrációváltozás hatására is nagy mértékben változtatják meg mechanikai tulajdonságaikat. Erre kiváló példa a vas (Fe) ötvözése szénnel (C), eredményül egy – a tiszta fémhez képest – jóval keményebb és erősebb anyag formálódik. Az ehhez hasonló tradicionális ötvözetektől eltérően 2004-ben Yeh és munkatársai kifejlesztettek egy 5 komponensű ún. nagyentrópiás ötvözetet (High Entropy Alloy – HEA) [1]. Az utóbbi évtizedekben kiemelt figyelem irányult ezen ötvözetekre az anyagtudomány területén, ugyanis többkomponensűségének köszönhetően még ígéretesebb mechanikai tulajdonságokkal rendelkezhetnek. A feltételezések be is igazolódtak, jelentősen magasabb folyásfeszültséggel és rendkívüli szívóssággal rendelkeznek [2, 3]. A periódusos rendszer nagy részét fémek alkotják, melyből számos nagyentrópiás ötvözet építhető fel. Mindezen ötvözetek ugyanarra az alappillérre épülnek, mely szerint a különböző atomok véletlenszerűen, de közel homogén módon oszlanak el az anyagban, de atomi méretkülönbségek ellenére rácsszerkezetet alkotnak, így fémes tulajdonságokkal bírnak. A kiemelkedő terhelhetőségük és ellenálló képességük mögött a véletlenszerű, változatos atomeloszlás áll, ugyanis a diszlokációk ilyen atomszerkezetben, a lokális inhomogenitás miatt – egyfázisú szerkezethez képest – akadályozott, ún. „stick-slip” mozgással képesek terjedni. Ilyen jellegzetes diszlokáció minta látható az 1.1. ábrán. A diszlokációvonalra külső terhelést helyezve az az anyag szimmetriái által meghatározott csúszósíkon elmozdul. A lokális diszlokációmag különböző atomokkal találkozik, mely jelentősen megbontja a diszlokációvonal eredeti alakját. Ezek alapján egyértelmű, hogy szoros, de egyben meglehetősen összetett kapcsolat áll fent a diszlokáció alakja és a HEA-k belső szerkezete között.



1.1. ábra. CrMnFeCoNi Cantor-ötvözet (HEA) TEM lamella terhelése során rögzített felvétel. A fekete vonalak a diszlokációvonalak, melyek alakján jól látható a véletlenszerű atomszerkezet következtében a fluktuációk.[4]

Több elméletet is kidolgoztak a HEA-k belső feszültségterének jellemzésére, melyek mind statisztikai alapokon nyugszanak. Ezek alapján belső feszültségtér eloszlására centrális határeloszlás szerint normális eloszlást kapunk [5]. Az elméleti modellek mellett csak

nagyon limitált mennyiségű kísérleti információ érhető el az ilyen ötvözetek lokális atomi struktúrájáról. Ezen probléma megoldására igen hasznos technikának mutatkozik a mesterséges intelligencia módszereinek alkalmazása. Segítségével a diszlokációvonal és az atomi elrendeződés kapcsolatát felhasználva, igen pontos eredményeket kaphatunk a belső feszültségtér jellemzésére. Egyszerűbb gépi tanulási módszerekkel egy diszlokációvonal alakjából következtetést vonhatunk le a belső feszültségtér szórására, mellyel igazolhatóvá válnának az elméleti modellek. Továbbá neurális háló alkalmazásával több egymást követő felvétellel belső feszültségtérkép lenne készíthető a diszlokáció által súrolt területről, ezzel explicit visszaadhatóvá válna a lokális belső atomi elrendeződést, mellyel az esetleges Gauss-eloszlástól való eltérések is vizsgálhatóvá válnának.

A Mesterséges Intelligencia (MI) módszerek közismert hátránya a tanításhoz szükséges nagy mennyiségű és jó minőségű tanítási adat, mely ezen probléma esetében diszlokációvonalak megbízható adatsora. A 1.1. ábrán bemutatott TEM felvételhez hasonló adat jelenleg csak limitált mennyiségben érhető el, mely nem elegendő a MI tanításához, illetve a belső feszültségtér karakterisztikája sem ismert a kísérleti felvételek esetében, így felügyelt MI módszerek tanítása nem lehetséges ilyen felvételeken. Az említett problémák áthidalása érdekében célszerű szimulált adatokon végezni a tanítást, ugyanis a kutatócsoportunk által kidolgozott **Depinning Diszlokáció Szimulátor** segítségével költséghatékonyan generálható az elméleti modelleknek megfelelő, kontrollált belső feszültségtérben mozgó diszlokációvonal. Az így konstruált adatokkal széles tartományon válik vizsgálhatóvá a feltételezett normál eloszlású belső feszültségtér fluktuációja, mellyel igazolhatóvá válhatnak a HEA-k belső szerkezetére vonatkozó elméletek gépi tanulási módszerek alkalmazásával.

Kutatásunk célja, hogy MI módszerekkel egy a HEA-k belső feszültségterét karakterizáló módszert fejlesszünk ki, mellyel visszaigazolást és mélyebb megértést kaphatunk a HEA-k belső szerkezetének struktúrájáról. A dolgozatban többfajta gépi tanulási módszert alkalmazva feltérképezzük a modellek – HEA-k belső feszültségterét imitáló virtuális normális eloszlású térben – szimulált diszlokációvonalakkal való taníthatóságának képességét, illetve azokon való predikciójának képességét. Ezentúl két különböző lehetséges diszlokációvonal jellemző vizsgálatát végezzük el. Ezen átfogó analízis során a modellekkel $R^2 \simeq 0.9$ determinációs együtthatót sikerül elérni. Reményeink szerint MI módszerek alkalmazásával lehetőségünk lesz tényleges nagyentrópiás ötvözetek feszültségterének karakterizálása.

A dolgozat során elsőnek mélyebb betekintést biztosítok a HEA-k szerkezetébe és deformációjába, melyhez elsőnek általánosságban a fémek szerkezetét és deformációját ismertetem (2. fejezet). Ezután ismertetem a dolgozatban felhasznált MI modellek alapvető működési elvét (3. fejezet). Ezt követően bemutatom a módszerünkhöz használt szimulátor modelljét és működését (4. fejezet). Végül ismertetem a módszer eredményeit, validálását, problémáit és távlati elképzeléseinket a módszer továbbfejlesztéséről (5-7. fejezet).

2. Diszlokációk komplex ötvözetekben

Mivel az általunk kutatott gépi tanulási módszer nagyentrópiás (komplex) ötvözetekben mozgó diszlokációvonalak alakja alapján prediktál az ötvözet belső feszültségterére, jelen fejezetben kitérek a kristályos anyagokra és az azokban található diszlokációk, és a komplex ötvözetek deformációs tulajdonságaira.

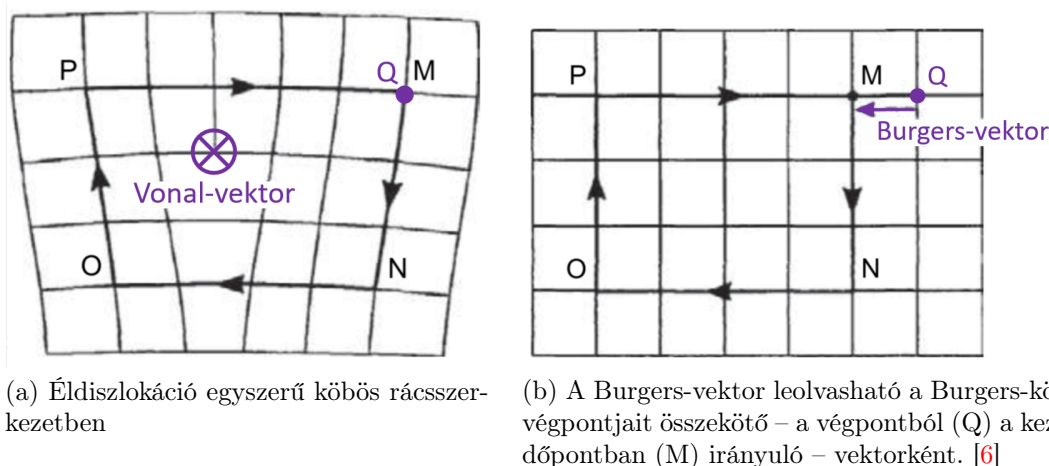
2.1. Kristályszerkezet és kristályhibák

Kristályszerkezetről akkor beszélünk, ha az anyagot alkotó atomok térben periodikusan helyezkednek el. A kristályszerkezetű anyagok esetében a periodikusságot csakis az anyag belsejére követeljük meg. A fémek többsége kristályszerkezettel bír. Ha a fém atomjaira a periodikusság nem teljesül, úgy az anyagot amorfnak nevezzük. A továbbiakban fémek alatt kristályszerkezetű fémeket értem. Gyakorlatban a kristályszerkezetű anyagok csak közelítőleg tökéletesen periodikus rácsszerkezetűek, mivel kristályosodásuk folyamán, vagy későbbi behatások okán kristályhibák keletkeznek az anyagban, mely jelentős hatással van a kristályos fémek mechanikai tulajdonságaira. Ezen hatások és tulajdonságok előtt előnyös tisztázni a lehetséges kristályszerkezeteket és kristályhibákat.

Egykomponensű fémek atomjai tehát periodikusan rendeződnek el az anyag határain belül. Az elrendeződés a 3 dimenziós térben többféle lehet: köbös, tetragonális, ortorombos, hexagonális, monoklin, triklin, valamint ezek közül többnek lapcentrált és tércentrált változata. Ezen szerkezetek tehát 3 dimenziós struktúrát alkotnak melynek minden csúcspontján egyszerű esetben ugyanazon atom helyezkedik el. Minden ideális periodikusságot megbontó eset kristályhibának tekinthető. Erre legegyszerűbb példák a ponthibák, a vakancia, amikor egy rácspontból hiányzik az atom, mikor egy atom nem rácsponton helyezkedik el (ennek nem szükségképpen kell azonos atomnak lennie a környező atomokkal - *intersticiális* atom), valamint a rácsszerkezetbe beillő, de a mátrix atomoknál nagyobb *szubsztitúciós* atom. A felsoroltak mind lokális, csak hőmérsékletre érzékeny diffúzióval képesek mozogni, mely következtében ezek mozgása csakis magas hőmérsékleten számottevő. Mikor a hiba nem csak egy atompozícióra terjed ki, hanem egymás mellett lévő atomok sora, azokat vonalhibáknak melynek fontos fajtája a diszlokáció. A fémek külső deformációra kiváltott rugalmatlan (maradandó) deformációja a diszlokációk mozgása révén történik, tehát jelentős szerepet játszik a fémek deformációjában, illetve annak mechanikai tulajdonságaiban.

Diszlokáció Egy diszlokációvonalat szemléletesen a következőképpen képzelhetünk el: Az egyszerűség kedvéért vegyük a 3 dimenziós köbös rácsszerkezetet. Vegyünk síkmet-szetet a köbös rácscella egyik lapjának megfelelő sík mentén. A metszet síkjára merőlegesen illesszünk egy félsíkot a kristályszerkezetbe, a (2.1a. ábra) szerint függőlegesen felülről. Ezen félsík az anyag belsejében végződő végélén értelmezhetjük a diszlokációvonalat, melynek kellően távoli környezetében (tipikusan 2-3 cellaparaméter távolságban) a rács közel torzulatlan. A diszlokációt meghatározni legalkalmasabban a Burgers-körön keresztül a **Burgers-vektorral** és a diszlokációhoz rendelhető **vonál-vektorral** lehet. A Burgers-kör egy diszlokációt tartalmazó kristályban körbe záruló atomonkénti lépésekből álló nyomvonal. Ennek megfelelő nyomvonalaz illusztrál a (2.1a. ábra). Amennyiben ugyanezt a nyomvonalat diszlokációmentes kristályban tekintjük (2.1b. ábra) és a nyomvo-

nal nem zárul, úgy a tényleges kristályszerkezet mindenképpen egy vagy több diszlokációt foglal magába. A nyomvonalat bezáró vektort azonosítjuk a **Burgers-vektorral** ($\mathbf{b}$). A **vonál-vektor** ($\mathbf{l}$) a diszlokációvonal menti érintővektorral definiálhatjuk.



2.1. ábra

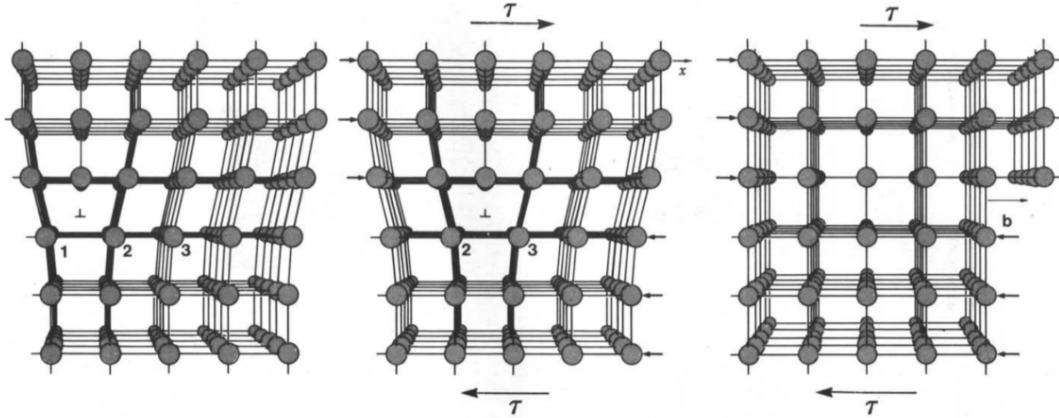
A Burgers-vektor és vonál-vektor relatív iránya szerint két fő típusa határozható meg a diszlokációknak:

- Éldiszlokáció: $\hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{l}} = 0$.
- Csavardiszlokáció: $\hat{\mathbf{b}} \cdot \hat{\mathbf{l}} = \pm 1$

Itt $(\cdot)$ művelet a skaláris szorzást jelöli, $\hat{\alpha} = \frac{\alpha}{|\alpha|}$ pedig az egységvektor jelölése. Míg jól izoláltan ez a két határeset különböztethető meg, addig a természetben főként ezek kombinációja jelenik meg.

Az éldiszlokációhoz rendelhető Burgers-vektor és vonál-vektor meghatározza a csúszósíkot, mely ezen két vektor által kifeszített sík. A diszlokáció ezen sík mentén (síknak megfelelő nyírőfeszültség) terhelés hatására képes elmozdulni. Ezt a fajta mozgását nevezzük csúszásnak. A diszlokációvonal csúszást szemléletesen a (2.2. ábra) mutatja be. Kellően magas hőmérsékleti környezetben az atomi diffúziók felerősödnek, melyek hatására a diszlokáció képes a csúszósíkból kitérni, melyet mászásnak nevezünk.

Diszlokációk kölcsönhatása és feszültségtere A kristályos anyagok plasztikus deformációja során diszlokációk kollektív mozgása valósítja meg a lokális atomi átrendeződést. Mivel diszlokáció környezetében az atomszerkezet átrendeződik, a diszlokációk járulékot adnak az anyag feszültségtéréhez. Izotrop végtelen anyagban egy az y tengellyel párhuzamos Burgers-vektorú éldiszlokáció ($\mathbf{b} = b \cdot \mathbf{e}_y$, ahol $\mathbf{e}_y$ az y irányú egységvektor), melynek vonál-vektora pedig a x tengely irányába mutat, az alábbi feszültségtér járulékot generálja a kristályszerkezetben [6, 8]:



2.2. ábra. Kristályszerkezetben diszlokációcsúszás által bekövetkezett maradandó deformáció sematikus ábrája (általánosságban $0,3 \text{ nm} \leq b \leq 0,5 \text{ nm}$). Az ábra a [7] könyv által inspirált

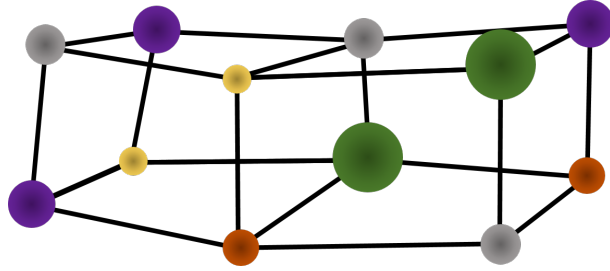
$$\begin{aligned}
 \sigma_{yy} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} z \frac{(3y^2 + z^2)}{(y^2 + z^2)^2} \\
 \sigma_{zz} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} z \frac{(y^2 - z^2)}{(y^2 + z^2)^2} \\
 \sigma_{yz} = \sigma_{zy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} y \frac{(y^2 - z^2)}{(y^2 + z^2)^2} \\
 \sigma_{xx} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{z}{y^2 + z^2} \\
 \sigma_{yx} = \sigma_{xy} = \sigma_{zx} = \sigma_{xz} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Az itt felírt egyenletek esetében μ az anyagra jellemző nyírási modulus, ν a Poisson-tényező. Ugyanilyen irányultságú vektorok esetében $\mathbf{b} = b \cdot \mathbf{e}_y$ Burgers-vektorú csavar-diszlokáció esetében fellépő feszültségtér járuléknak a következő formája adódik [6]:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} = \sigma_{yx} &= -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{z}{x^2 + z^2} \\
 \sigma_{zy} = \sigma_{yz} &= \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{(x^2 + z^2)} \\
 \sigma_{xx} = \sigma_{zz} = \sigma_{xz} = \sigma_{zx} &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

2.2. Összetett kristályötvözetek

Összetett ötvözeteknek nevezzük azon ötvözeteket amely 3 vagy annál több komponenst tartalmaznak. Ilyenek a nagyentrópiás ötvözetek is, melyek egyik definíciója, hogy minimum 5 komponenst tartalmazzon, közel egyenlő arányban. Ezen 5 komponensű ötvözetek kristályszerkezetet alkotnak megfelelő ötvöző elemek kombinációja során, melynek úttörő példája a felfedezőjéről elnevezett Cantor-ötvözet ($\text{Fe}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Co}_{20}$) [9]. Az ilyen fajta ötvözeteket szemléletesen a (2.3. ábra) alapján lehet elképzelni. A HEA-k bel-



2.3. ábra. Az összetett kristályos ötvözetekben fellépő rács disztorzio sematikus ábrázolása.

ső feszültségterének jellemzése a következő gondolatmenettel alapozható. A nagyentrópiás ötvözetek esetében minden rácponton véletlenszerűen találjuk az 5 komponens egyikét, ahogy ezt kísérletileg TEM elektron energiadiszerzív spektrometria kimutatták [10]. Ebből következően: I) a komponensek közti méretkülönbség miatt II) az atompáronkénti fémes kötés energiája más-más nagyságú, így az ideális rácsszerkezet kis mértékben torzul a tökéletes rácsszerkezethez képest. helyzetbe. Más szóval mondva véletlen disztorzio lép fel a rácsszerkezetben. Megmutatható, hogy periodikus rácsszerkezetbe, de véletlen eloszlás szerinti sorrendbe helyezzük le az atomokat – melyeket együttesen mint egy rugalmas homogén kontinuum értelmezzünk –, akkor a tetszőlegesen origóba vett atomra felírható az atomi nyírófeszültség mint az összes környező zárvány által generált nyírófeszültség összege:

$$\tau_{ij}(\mathbf{0}) \sim \sum_{n=1}^N \mathcal{G}_{ij}(\mathbf{R}_n), \quad (2.3)$$

ahol $\mathcal{G}_{ij}$ i és j gömb alakú zárvány közötti nyírófeszültség függvénye a rácsvektor $\mathbf{R}_n$ függvényében. Mivel a tér minden irányába véletlenszerűen vannak az rácpontokra elhelyezve a zárványok, úgy érvelhetünk azzal, hogy a $\mathcal{G}_{ij}$ egy $\mathbf{R}_n$ -től függő véletlen változó, melyek összegzésére meg lehet mutatni, hogy a centrális-határeloszlás tétel teljesül és annak következtében τ_{ij} komponensei normál eloszláshoz tartanak[5]. Az így kialakult torzult atomszerkezet hatására, véletlenszerű belső feszültségtér keletkezik. Az eddigi HEA-ra vonatkozó kísérleti tanulmányok alapján a tipikus rácsparaméter [11, 12]:

$$a_{\text{HEA}} \approx 0.33 \text{ nm}. \quad (2.4)$$

A térben fluktuáló belső feszültségtérben külső feszültségtér hatására mozgó diszlokációvonal, a váltakozó tér miatt görbül, kihajlik és a lokális feszültségtér minimumokat által meghatározott pozíciókba rövid ideig megragad („pinning”). A külső terhelést tovább növelve a diszlokációvonal kiszabadul a véletlen feszültségtér energiaminimumból („depinning”), majd a következő energia völgy pozíciója szerint helyezkedik el. Ezt a mozgásformát tapadás-csúszás („stick-slip”) mozgásnak nevezzük.

A véletlenszerű közegben való vonal haladásának (jelen problémakörben a diszlokációvonal) alaposan kidolgozott modelljei vannak, melyek közül egyik nevezetes a quenched Edwards-Wilkinson (qED) rendszer egyenletére alapszik [13]. Ezen modell esetében egy az x - y síkon, $R(x, y)$ véletlen erőterben mozgó rugalmas határvonalt $h(x, t) = y$ veszünk. Továbbá külső terhelés (A) figyelembevételével a mozgás egyenlet a következő formát ölti:

$$\partial_t h = \partial_x^2 h + R(x, h) + A. \quad (2.5)$$

Ahol az egyenlet baloldalán a $h(x, t)$ diszlokációvonal időbeli fejlődése, a jobb oldal első tagja az elasztikusnak tekintett diszlokációvonal által önmagára kifejtett rugóerő, a középső $R(x, h)$ tehát a diszlokációvonal által érzékelt $\mu = 0$ átlagú fluktuáló erőteret, míg az utolsó tag reprezentálja a konstans külső erőteret. Amennyiben $A \ll R(x, h)$ úgy a diszlokációvonal egyensúlyi konfigurációba kerül, melyből csakis további külső terhelés növeléssel képes a diszlokációvonal kimozdulni. A rendszerben a folyás határ A_f a diszlokációvonal konstans véges átlagsebességével definiálható. Ezen modell alkalmas nagyentrópiás ötvözetekben izolált diszlokációvonal mozgásának leírására.

3. Mesterséges Intelligencia

Jelen dolgozatban diszlokációvonal alakjából egy darab folytonos paraméter jóslása a célunk. Ezen nem túl komplex probléma megoldására könnyen interpretálható a Mesterséges Intelligencia klasszikus alcsoportjába tartozó Gépi Tanulási módszereket (GTM) használunk. Az ilyesfajta modellek általában strukturált, tabuláris¹ adatot igényelnek, mely ritkán nyers adat, többségben inkább az abból származtatott ún. jellemzőkkel reprezentált adattáblázat. Diszlokációvonal esetében könnyen generálhatóak ilyen jellemző mennyiségek. Általánosságban beszélve a jellemzőket a következőképp jelöljük:

$$\mathbf{X}^i = X_j^i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad j = 1, 2, \dots, J,$$

ahol N az nyers adat hossza, mely a dolgozat esetében a szimulált diszlokációvonalak számossága, J az egy darab nyers adathoz rendelt jellemzők számossága. Ezek alapján X_j^i a tabuláris $N \times J$ méretű adathalmaz mátrix egy eleme. Az egész adathalmazt jelölje az egyszerű $\mathbf{X}$. Mikor ismert az $\mathbf{X}^i$ -hez tartozó címkék értéke (jelölje $y_{\text{tls.}}^i$), akkor a modellt felügyeltnek, a címkék ismerete nélkül felügyeletlennek nevezzük. Amennyiben tehát ismert a $(\mathbf{X}^i, y_{\text{tls.}}^i)$ pár $\forall i$ -re, úgy a modell ezen az adathalmazon való tanítása után alkalmazható újabb $(\mathbf{X}')^m$ adathalmaz alapján prediktálásra. Mivel esetünkben a szimulációkból nyert adat esetében ismert a belső feszültségtér szórása, a továbbiakban felügyelt módszerekről beszélek. A HEA-k belső feszültségterének szórása folytonos fizikai mennyiség, ennek megfelelően tanulmányom során regressziós modelleket alkalmazok. Mivel felépítésük okán egyes modellek jobban teljesítenek adott probléma esetében több egymástól különböző struktúrájú modellt választottam. A modellek eredményének interpretálásához szükséges azok felépítésének ismerete valamint a modellek eredményének minőségét jellemző metrika definiálása. Általános felügyelt GTM esetében a következő jelölések bevezetése érdemes: Van tehát egy a modell algoritmusának megfelelő hozzárendelési szabály: F , ami a bemeneti paraméter vektor $\mathbf{X}^i = X_j^i$ alapján prediktál valamilyen kimeneti skaláris $F(\mathbf{X}^i) = y_{\text{pred.}}^i$ mennyiséget. A hozzárendelési szabálynak általánosan vannak belső paraméterei az ún. súlyok ω , mely a modell jellegétől függően más és más mennyiség. Egy GTM modell teljesítményét többféleképpen is jellemezhetjük a prediktált és a tényleges paraméterek összehasonlításával. Regressziós modellek esetében többek között a következő formulák használatosak:

¹táblázatos

- átlagos négyzetes hiba (Mean Squared Error - **MSE**):

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{\text{pred.}}^i - y_{\text{tls.}}^i)^2.$$

- az MSE-ből származtatható a gyök átlagos négyzetes hiba (Root Mean Squared Error - **RMSE**), mely tehát:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\text{MSE}}.$$

Kifejezetten hasznos az eredmények értelmezése kapcsán, mivel dimenzionálisan összeegyeztethető a prediktált $y_{\text{pred.}}$ értékkel.

- **R^2** :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_{\text{pred.}}^i - y_{\text{tls.}}^i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_{\text{tls.}}^i - \langle y_{\text{tls.}} \rangle)^2},$$

ahol $\langle y_{\text{tls.}} \rangle$ a tényleges értékek átlaga, a számláló pedig a már definiált MSE. Ezek alapján jól látható, hogy tökéletes predikció esetén $R^2 = 1$, mivel $\text{MSE} = 0$. Amennyiben a model predikciója a tényleges értékek átlagával egyezik meg úgy $R^2 = 0$, annak esetében ha a modell ennél is rosszabbul teljesít úgy $R^2 < 0$.

A GTM-ek tanítása a tanuló adathalmazon történik. Általában a model hozzárendelési szabályának megfelelő költségfüggvény $L(\omega)$ belső súlyok (ω) szerinti minimalizálásának elve alapján tanul. Fontos kiemelni, hogy sok algoritmus ettől teljesen eltérő elv alapján optimalizálja belső paramétereit.

Az adatok feldolgozásához és a gépi tanulási modellek implementálásához a scikit-learn könyvtárat használtam [14]. A könyvtár algoritmusai külön bemeneti paraméterekkel rendelkeznek, melyek közül a modell belső ún. **hiperparamétereit** texttt betűtípussal jelölöm. Annak érdekében, hogy az eredményeket tisztán értelmezzük a fejezet további részében röviden bemutatom a predikcióhoz felhasznált modellek működési elvét.

3.1. Lineáris regresszor

(rövidítve LinReg) A létező legegyszerűbb GTM modell mely a bemeneti $\mathbf{X}$ adat és az eredményérték $y = F(\mathbf{X}^i)$ között lineáris összefüggést feltételez a következő módon:

$$F(\mathbf{X}^i) = \omega_0 + \sum_{j=1}^{J+1} \omega_j X_j^i, \quad (3.1)$$

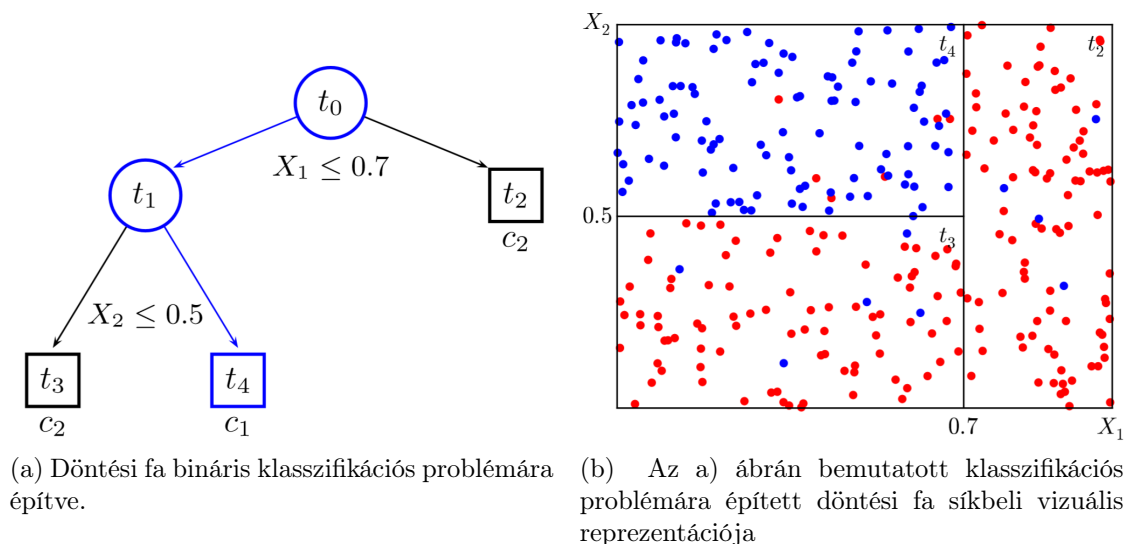
ahol ω $J + 1$ dimenziós vektor. A modell költségfüggvénye kvázi megegyezik az MSE-vel, ennek megfelelően a modell az MSE minimalizálásával éri el a lehető legjobb illesztést. Az MSE és ω szerinti deriváltjának számítása egyszerű, így számításigénye kifejezetten alacsony. A modell egyszerűsége, viszont csakis lineáris összefüggést képes feltételezni, mely sok probléma esetén nem elegendő az összefüggés jóslásához.

3.2. Legközelebbi szomszédok módszere

(K Nearest Neighbours - KNN) Az adathalmaz $\mathbf{X}$ egy J dimenziós térben helyezkedik el, ahol minden $\mathbf{X}^i$ egy pontot jelöl ki. Az adathalmaz pontjait a tényleges $y_{\text{tls.}}$ értéknek megfelelően címkézzük. Az így meghatározott J dimenziós térbe egy új prediktálni kívánt $\mathbf{X}_{\text{új}}^i$ adatpontot helyezve meg kell határozni minden adatponttól mért távolságát, majd a távolság függvényében a legközelebbi k szomszéd címkéjének átlagértékét rendeljük az új adatponthoz. A modell két fő hiperparaméterrel rendelkezik: I) A $\mathbf{X}_{\text{új}}^i$ környezetében figyelembe vett k szomszéd száma (`n_neighbours`), II) A távolság számításához használt metrika (`metric`). Ezen két paraméter változtatásával érhető el a legjobb teljesítmény. Ennek a modellnek az esetében nincs egyértelmű szabály arra vonatkozólag, hogy mi a megfelelő paraméter, így annak optimalizálása csakis utómunka során a teszt adathalmazon elért teljesítmény metrikák alapján lehetséges.

3.3. Döntési fákra alapuló regresszorok

Mindkét alábbi regressziós algoritmus döntési fákra alapszik, ennek okán elsőnek ezen modell struktúráját és működését tisztázom. Mint ahogy a neve is mutatja, egy roppant egyszerű döntések hierarchikusan felépített hálózatról van szó. Amennyiben adathalmazunkat továbbra is J dimenziós térben $y_{\text{tls.}}$ szerint címkézve képzeljük el, akkor a döntési fa egyes döntési pontja a tér egy $J - 1$ dimenziós hipersíkkal való kettéosztásának felel meg. Könnyen elképzelhető $J = 2$ dimenzió esetén, hogy kellő mennyiségű optimálisan megválasztott hipersíkokkal – jelen esetben választvonalakkal – megfelelően körbeskatulyázható minden címke tartománya (3.1. ábra).



3.1. ábra. Példa döntési fa klasszifikációs problémájára.[15]

A döntési fák tanítása intuitív módon megérthető. A döntési fák struktúrája egy fa-gráfnak tekinthető melynek bármely két csúcsa egy vonal köti össze. A csúcsok döntési fák esetében döntési csomópontok melyet t -vel jelölünk. Minden t döntés esetében a t -dik csomópontra jutó adat ($\mathbf{X}^t$) bináris szétválasztása (jelölje s) történik, melynek hatására a keletkeznek az utód csomópontok t_B és t_J . Ha valamilyen oknál fogva egy csomópont

nem oszlik további csomópontokra úgy azt terminális-csomópontnak nevezzük (jelölje $\hat{t}$). Egy fa építése indukciós módon történik, tehát elsőnek a teljes adathalmazt egy döntéssel két részre választódik, majd az eredményül kapott újabb döntési ágak mentén újabb és újabb döntéseket képzünk. A t -dik döntés esetében minden érdemleges bináris szétválasztást figyelembe veszünk, a lehetséges szétválasztások közül az algoritmus azt választja, mely által az adat *tisztasága* $i(t)$ legnagyobbat növekszik $\underset{s}{\operatorname{argmax}} \Delta i(s, t)$, ahol

$$\Delta i(s, t) := i(t) - p_B i(t_B) - p_J i(t_J). \quad (3.2)$$

Az előző kifejezésben szereplő p_B, p_J a kettéosztott adathalmazok hányada a t -dik döntésre jutó adathalmazhoz képest ($p_B = \frac{N_{t_B}}{N_t}$, $p_J = \frac{N_{t_J}}{N_t}$). Regressziós döntési fák esetében $i(t)$ a t -dik csomópont esetében a lokális címkék varianciájának felel meg:

$$i(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{y \in \{y\}_t} (y - \langle y \rangle_t)^2, \quad (3.3)$$

ahol tehát $\{y\}_t$ a tanuló adathalmaz $\mathbf{X}_{\text{tanuló}}$ t csomópontra jutó részhalmazához rendelhető y címkék halmaza, $\langle y \rangle_t$ a t pedig csomópontra jutó $\{y\}_t$ halmaz átlaga ($\langle y \rangle_t = \frac{1}{N_t} \sum_{y \in \{y\}_t} y$).

A fa méretét jellemezhetjük a mélységével, mely a kezdő és a legtávolabbi terminális-csomópont közti távolságként érdektő. Túl „mély” faméret választva az algoritmus érzékennyé válik az adathalmazban rejlő zaj, míg túl „sekély” fa esetén az algoritmus nem képes az adathalmazban rejlő lényeges információk megragadására. Tehát a fa méretének meghatározása kritikus a modell teljesítménye szempontjából. A fa méretét egyértelműen meghatározza, hogy adott ágon meddig építünk további csomópontokat, így azok építésének leállítási kritériuma kulcsfontosságú a fa mérete szempontjából. A túlilleszkedéstől függetlenül egy t csomópont terminális-csomóponttá válik amennyiben a csomópontra jutó adathalmaz homogén, azaz a lokális $i(t) = 0$. Továbbá mikor a csomópontra jutó adathalmaz X_j koordináták alapján nem osztható tovább. A túlilleszkedés megelőzése érdekében további leállítási szabályok szükségesek, melyek külsőleg szabályozható hiperparaméterektől függenek:

- A t csomópont terminális-csomópont amennyiben kevesebb adat érkezik hozzá mint az a `min_samples_split` hiperparaméter által meghatározott.
- A t csomópont terminális amennyiben annak mélysége d_t meghaladja a hiperparaméter `max_depth` méretét.
- A t csomópont terminális-csomópont amennyiben a lokális $\Delta i(s, t)$ csökkenés kisebb mint a `min_impurity_decrease` hiperparaméter.
- A t csomópont terminális-csomópont amennyiben nincs olyan szétválasztás melynek következtében az új leendő döntések t_B és t_J egyikének adathalmaz számossága sem haladja meg a meghatározott `min_samples_leaf` hiperparaméter értéket.

Mikor egy terminális-csomópont $\hat{t}$ épül, olyankor a terminálishoz egy kimeneti paramétert generál a terminális-csomópontra eső $(\mathbf{X}^{\hat{t}})^i$ adatpontokhoz tartozó $\{y\}_{\hat{t}}$ halmazból. Ez a halmaz átlaga értéke, azaz $\langle y \rangle_{\hat{t}}$. Mikor a döntési fát predikcióra használjuk a bemeneti $\mathbf{X}^i$ adatpont végighalad a fa csomópontjain azok (már fix) döntési szabályainak

megfelelően, majd végül egy terminális csomóponthoz ér. A kimeneti érték tehát a $\hat{t}$ -hez rendelt $\langle y \rangle_{\hat{t}}$ lesz.

A döntési fák alapvető működésével megismerkedve készen állunk, hogy több döntési fák együttes kombinációjának hatását kiaknázó modellekkel megismerkedjünk.

3.3.1. Véletlen erdő regresszor

(Random Forest Regressor - RFR) A véletlen erdő módszer `n_estimator` számú döntési fa párhuzamos tanítását alkalmazza a következő módszer szerint. A bemeneti $\mathbf{X}$ adathalmazból az ún. bootstrap módszer szerint `n_estimator` kvázi új adathalmazt generál. A bootstrap módszer lényege, hogy az adathalmaz i indexe szerint² véletlen eloszlású visszatevéssel történő mintavételezéssel gyárt új adathalmazt. Az új adathalmazok esetében a $\sqrt{J}$ értékének egészrész számú véletlenszerűen³ választott jellemzőt veszünk figyelembe a külön adathalmazokra épített fák tanítása során. Az RFR-rel való predikció során az `n_estimator` számú döntési fa eredményeinek átlagát véve kapjuk a regresszor kimeneti eredményét. A bootstrap módszer és a döntési fák jellemző redukció módszerét egyben 'bagging' módszernek nevezzük. Az ilyen GTM modellek látványosan jobb teljesítményt érnek el mint egyszerű döntési fa társaik.

3.3.2. Gradiens gyorsító regresszor

(Gradient Boosting Regressor - GBR)

Az RFR-ekkel ellentétben ez a modell döntési fák egymás után kötése révén prediktál. A tanulási procedúra legjobban egy véges sorközelítésnek feleltethető meg, ahol minden sortag egy kis méretű modellt, jelen esetben döntési fa predikciójának járuléka. A GBR-ek terminológiája szerint az ilyen kis méretű modelleket *bázis* modelleknek nevezzük, melyet nagy modell köt össze. A modell tanulása az alábbi pontok szerint történik [16]: **0.lépés**) A modellt inicializáljuk az

$$F_0(\mathbf{X}) = \underset{\gamma}{\operatorname{argmin}} \sum_i^N L(y_{\text{tls.}}^i, \gamma) \quad (3.4)$$

eljárás szerint, azaz keressük azt a γ értéket mely minimalizálja az tényleges értékhez viszonyított költségfüggvényt. Amennyiben a következő költségfüggvény alakot használjuk

$$L(y_{\text{tls.}}^i, \gamma) = \frac{1}{2}(y_{\text{tls.}}^i - \gamma)^2 \implies \sum_i^N \frac{\partial L(y_{\text{tls.}}^i, \gamma)}{\partial \gamma} = \sum_i^N (y_{\text{tls.}}^i - \gamma) \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.5)$$

azt kapjuk, hogy a tényleges értékek átlaga a keresett érték $\gamma = \frac{1}{N} \sum_i^N y_{\text{tls.}}^i = \langle y_{\text{tls.}} \rangle$. Tehát $F_0(\mathbf{X}) = \langle y_{\text{tls.}} \rangle$ **1/2.lépés**) Egy ciklust indítunk, melynek ciklus paramétere m végigiterál az $[1, M]$ intervallumon, ahol M egy külsőleg kontrollálható hiperparaméter (`max_iter`). A további számozott lépések mind a cikluson belül végrehajtandók. **1.lépés**) Számítsuk ki a következő értéket:

²azaz, a rögzített adatpontok szerint.

³visszatevés nélkül

$$r_{im} = - \left[\frac{\partial L(y_{\text{tls.}}^i, F(\mathbf{X}^i))}{\partial F(\mathbf{X}^i)} \right]_{F(\mathbf{x})=F_{m-1}(\mathbf{x})}, i = 1, \dots, N. \quad (3.6)$$

A kifejezésben szereplő $\frac{\partial L(y_{\text{tls.}}^i, F(\mathbf{X}^i))}{\partial F(\mathbf{X}^i)}$ deriválást már a (3.5. egyenlet) során elvégeztük, mely alapján:

$$r_{im} = - [(y_{\text{tls.}}^i - y_{\text{pred.}}^i)]_{y_{\text{pred.}}=F(\mathbf{x})=F_{m-1}(\mathbf{x})}, i = 1, \dots, N. \quad (3.7)$$

Az $m = 1$ példáját megvizsgálva $y_{\text{pred.}}^i = \langle y_{\text{tls.}} \rangle$, amit ha beillesztünk (3.7. egyenlet)-be $r_{i1} = \langle y_{\text{tls.}} \rangle - y_{\text{tls.}}^i$ az tényleges érték azok átlagától való eltérést kapjuk. Az r_{im} mennyiséget általános költségfüggvény esetén pszeudo-különbségnek nevezik.

2.lépés) A pszeudo-különbségekre illesszünk egy döntési fát az eredeti $\mathbf{X}$ szerint, melynek m -ik iterációban illesztett terminális csomópontját a R_{lm} jelöli, ahol $l = 1, 2, \dots, \#\{\hat{t}\}$ ⁴. Az illesztéshez használt modellt nevezzük bázis modellnek. **3.lépés)** A terminális csomópontok alapján kiszámítjuk a γ_{jm} értéket:

$$\gamma_{lm} = \underset{\gamma}{\operatorname{argmin}} \sum_{\mathbf{X}^i \in R_{lm}} L(y_{\text{tls.}}^i, F_{m-1}(\mathbf{X}^i) + \gamma) \stackrel{(3.5)}{\implies} \sum_{\mathbf{X}^i \in R_{lm}} (y_{\text{tls.}}^i - F_{m-1}(\mathbf{X}^i) - \gamma) \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.8)$$

ami $m = 1$ esetén a következő egyenlőségnek felel meg: $\sum_{\mathbf{X}^i \in R_{lm}} (y_{\text{tls.}}^i - \langle y_{\text{tls.}} \rangle - \gamma) = \sum_{\mathbf{X}^i \in R_{lm}} (r_{i1} + y) = 0$. Tehát a γ_{lm} értékei mindig a terminális csomóponton lévő adatok átlaga. **4.lépés)** Az F_m függvény következő tagját az alábbi hozzárendeléssel frissítjük:

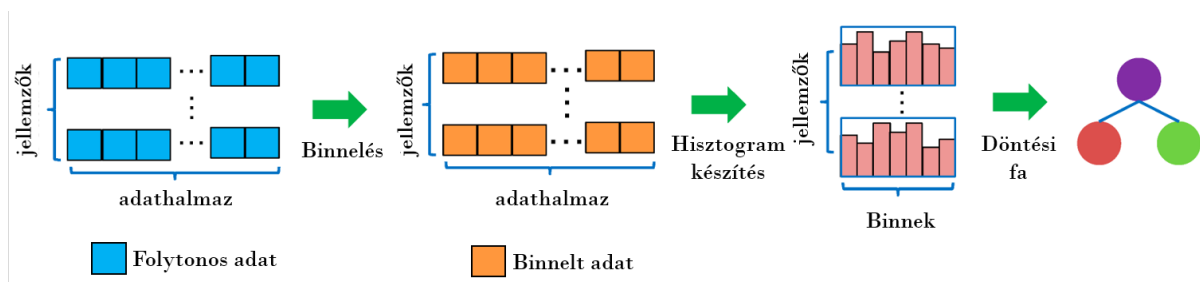
$$F_m(\mathbf{X}) = F_{m-1}(\mathbf{X}) + \nu \cdot \sum_{l=1}^{L_m} \gamma_{lm} I(\mathbf{X} \in R_{lm}), \quad (3.9)$$

ahol $l \in L_m$ az m . bázis modell összes terminális csomópontján fut végig, $\nu > 0$ pedig a tanulási ráta, a GBR modellek sajátos hiperparamétere, mely a gyakorlatban általában $\nu = 0.1$. **Végezetül)** a modell teljes hozzárendelési szabályát egy sorösszeggel kapjuk:

$$F(\mathbf{X}) = \sum_m^M F_m(\mathbf{X}) \quad (3.10)$$

Hisztogram GBR A dolgozatban ténylegesen felhasznált GBR modell a Hisztogram Gradiens gyorsító regresszor (Hist Gradient Boosting Regressor - HGBR), mely a GBR egy továbbfejlesztett verziója. A HGBR az általános GBR-nél sokkal jobb időhatékonysággal dolgozó algoritmus, melynek kulcsa a bemeneti $\mathbf{X}$ értékek diszkrét értékekre való felbontásában (binelésében) rejlik. A módszer fő gondolatát a (3.2. ábra) mutatja.

⁴A terminális-csomópontok számossága



3.2. ábra. Hisztogram Gradiens Gyorsító Regresszor specifikus módszerének sematikus bemutatása. A bemeneti folytonos adathalmazt $\mathbf{X}$ ideális felbontás szerint diszkrétizálja majd a diszkrét értékekhez kalkulálja ki az 1.lépés)-ben definiált gradiens tagokat, ezzel effektíve a gradiens kalkulációt egyszerű hisztogram frissítésé módosul. Az így konstruált pszeudo-különbségekre döntési fát illeszt a rendszer, mely során a diszkrét értékek között így sokkal effektívebb megfelelő szétválasztást találnia a fának. A konstruált modell általánosanw nagyságrenddel gyorsabb nagy méretű ($N > 10^4$) adathalmazok tanulás folyamán. [17]

4. Diszlokáció Depinning Szimulátor

A HEA-k belső feszültségterét az ötvözetben mozgó diszlokációvonalból nyert információk alapján tanított GTM alkalmazásával szeretnénk jellemezni. Ahhoz, hogy a modellek pontosan és megbízhatóan prediktáljanak nagy mennyiségű tanuló adathalmaz szükséges. Ugyan léteznek mérőeszközökkel készített felvételek diszlokációvonalokról, de azok vagy publikusan nem hozzáférhető adatok, vagy olyan kis méretű adathalmaz, hogy a modellek sikeres tanításához minden bizonnyal nem elég. Továbbá a GTM-ek tanításához szükséges tényleges belső feszültségtér szórás paraméterek egyáltalán, vagy csak nagyon korlátozottan érhetőek el. Ezen probléma áthidalására rendkívül hasznos a szimulációs adatok használata, hiszen így különböző mérés technikai módszerek alkalmazása és adatelemzés nélkül – a valóságnak megfeleltethető – nagy mennyiségű adat válik hozzáférhetővé, illetve így a szimuláció belső feszültségtér nagy pontossággal kontrollálható. Következésképpen a GTM módszerek tanítására a HEA-ban mozgó diszlokációvonalra jellegzetes pinning-depinning stick-slip mozgást imitáló szimulációkból nyert diszlokációvonal alakprofilokat használunk fel. A fejezet során a dolgozatban felhasznált, a [18]-ben kifejlesztett módszer szerint implementált szimulátor [19] (DDS) implementációjára és az abban alkalmazott modellre térünk ki.

4.1. A szimulátor modellje

A szimulátor 2 dimenziós diszlokáció $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ egységvektorok által kifeszített csúszósíkot síkot modellez egy diszkrét ($L_x \times L_y$)-es négyzetrácsal, ahol a szimuláció mesterkelt négyzetrács rácsparaméter össze-egyeztethető a szimulálni kívánt csúszósík Burgers-vektorjával. A szimulációs tér négyzetrácsai bináris értéket vesznek fel aszerint, hogy plasztikusan deformálódtak-e. Amennyiben a diszlokáció vonal már áthaladt rajtuk, úgy 1 az értékük, ellenkező esetben 0. Ebből következően a diszlokáció vonalat a különböző értékű cellák határvonalán értelmezzük, melyek a diszkrétizáció miatt rácslél hosszúságú diszlokáció szegmensekből állnak. A szimulációs tér x dimenzió szerint periodikus határfeltételnek

felel meg.

A diszlokáció időbeli terjedése random dinamikával implementált. A modell minden időlépés esetén egyenletes eloszlás szerint választ egy diszlokáció szegmenst. A szegmenst az arra ható összefeszültség iránya szerint egy rácsparaméterrel mozdtítja el. Az $\mathbf{r}(x, y)$ helyen lévő szegmensre ható (tisztá) nyíró feszültség a következő tényezőkből adódik össze:

$$\tau(\mathbf{r}) = \tau_{\text{külső}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{pin}}(\mathbf{r}) + \tau_{\text{kcs.}}(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

ahol $\tau_{\text{külső}}(\mathbf{r})$ a külső terhelésből adódó feszültség. Ez a feszültségérték időben változik: (1) minden időlépéssel a **stress_rate** paraméter alapján lineárisan növekszik, (2) az anyagi merevséget jellemző B paraméterrel arányosan $\Delta\tau_{\text{külső}} = -B \cdot \Delta A$ mennyiséggel csökken, ahol ΔA a diszlokáció elmozdulása során súrolt terület. A $\tau_{\text{pin}}(\mathbf{r})$ a tetszőlegesen választható, HEA-k esetében a véletlenszerű $(L_x \times L_y)$ -es $\mathbf{r}$ helyen kiértékelt belső feszültségtér. Illetve $\tau_{\text{kcs.}}(\mathbf{r})$ a többi diszlokáció szegmens rácstorzulásból eredő együttes feszültségtérnek a járuléka, mely a diszlokáció karaktere alapján két részből adódik:

$$\tau_{\text{kcs.}}(\mathbf{r}_i) = \sum_l^{\{\text{él}\}} \tau_{\text{él}}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_i) + \sum_j^{\{\text{csavar}\}} \tau_{\text{csavar}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i). \quad (4.2)$$

Ahol az él és csavar diszlokáció szegmensre vonatkozó kölcsönhatási feszültségtér a Burgers-vektor iránya szerint a táblázatban feltüntetett formát ölti (1. táblázat).

Karakter	$\mathbf{b} \parallel \mathbf{x}$	$\mathbf{b} \parallel \mathbf{y}$
$\tau_{\text{csavar}}(\mathbf{r})$	$\bar{S}\mu b^2 y / (4\pi r^3)$	$\bar{S}\mu b^2 x / (4\pi r^3)$
$\tau_{\text{él}}(\mathbf{r})$	$\bar{S}\mu b^2 x / [4\pi(1 - \nu)r^3]$	$\bar{S}\mu b^2 y / [4\pi(1 - \nu)r^3]$

1. táblázat. Kölcsönhatási feszültségek karakter szerint bontva. μ, ν , a közegre jellemző nyírási-modulus, és a Poisson-tényező, $\mathbf{b}, b$ a Burgers-vektor és annak hossza, $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ a rendszer koordináta irányú egységvektorai. $\mathbf{r}$ a kölcsönható diszlokáció szegmensek relatív távolság vektora, míg x, y a relatív koordináták.

A fenti táblázatban található $\bar{S} := S_1 S_2$ fejezi ki kölcsönhatásban résztvevő két S_1, S_2 diszlokációszegegens relatív kölcsönhatás viszonyát, miszerint az kölcsönható diszlokáció szegmensekhez rendelhető a:

$$S = \mathbf{l}(\mathbf{x} + \mathbf{y}), \quad (4.3)$$

ahol $\mathbf{l}$ a szegmens vonal-vektora, $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ a rendszer koordináta egységvektorai. Ennek megfelelően a szegmens lehet $S = \pm 1$ értékű. Amennyiben karakter szerint megegyező diszlokációpárt vizsgálunk úgy $\bar{S} = +S_1 S_2$, ellenkező esetben $\bar{S} = -S_1 S_2$.

4.2. Szimulátor paraméterei

A szimuláció indításához egy ún. **control_file** szükséges, mely a szimuláció alapvető paramétereit tartalmazza. Az alábbi lényeges paraméterek állíthatóak ezen fájlban:

Elasztikus paraméterek

- **mu** (μ): A rendszer nyírási modulusa. Mivel a kölcsönhatási tagok (1. táblázat) egyenesen arányosak a nyírási-modulussal, így egyszerűen a $\tau_{\text{külső}}$ és τ_{pin} feszültségértékeket skálázza.
- **Poisson** (ν): A szimulációs közeget jellemző Poisson-tényező, mely a kölcsönhatási tagban jelenik meg
- **Burgers** (b): A Burgers-vektor hossza, melynek értéke megegyezik tehát a rácsparaméterrel.
- **spring_constant** (B): A külső feszültségtér mekkora mértékben esik vissza plasztikus megnyúlás, tehát diszlokációvonal csúszás esetén: $\Delta\sigma_{\text{külső}} = -B \cdot \Delta A$

Konfigurációra vonatkozó paraméterek

- **Lx** (L_x): A szimulációs tér szélessége cellaszám szerint megadva.
- **Ly** (L_y): A szimulációs tér magassága cellaszám szerint megadva.
- **initial_height**: A szimulációs térbe helyezett diszlokációvonal y szerinti kezdőmagassága. Az így megadott magasságban lévő cellasorba inicializálja az egyenes diszlokációvonalat.
- **vertical_burgers**: A vízszintes diszlokációvonalra meghatározza annak karakterét. Amennyiben az érték 0, akkor csavar, amennyiben 1 akkor él diszlokációként veszi a program.

Terhelésre vonatkozó paraméterek

- **stress_init** ($\tau_{\text{külső}}^{\text{init}}$): A szimuláció kezdeti külső feszültség értékét állítja.
- **stress_rate** ($\Delta\tau_{\text{külső}}$): Az iterációnkénti külső feszültség növekedés. Fontos megjegyezni, hogy a szimuláció során általában nem ekkora értékkel változik, ugyanis a $\tau_{\text{külső}}$ értékét plasztikus deformáció esetén a **spring_constant** is befolyásolja.

Továbbá minden szimuláció esetében megadható a véletlen dinamikához felhasznált pszeudo-random egyenletes eloszlás **seed**-je. A szimuláció indításához továbbá szükséges megadni az $L_x \times L_y$ méretű belső feszültségteret tartalmazó fájlt.

4.3. Kimeneti fájlok

Szegmens fájl A szimulátor a megadott kimeneti könyvtárba menti a szimuláció során rögzített adatokat. A diszlokációvonal előre megadott iterációnkénti konfigurációjáról szegmens fájlokat (iteráció.**seg**) rögzít, mely a cella okkupációs határvonala által meghatározott diszlokációvonal szegmensek középponti x, y koordinátáit rögzíti a koordinátáknak megfelelő két sorba.

Feszültség fájl A szimuláció során minden iterációra a program kimentti a következő értékeket:

- *it*: iterációs szám,
- *A*: A diszlokáció által súrolt felület, amit rendszer cellaterület egységben mér.
- $\tau_{\text{külső}}$: A külső feszültség értéke

5. Metodika

5.1. Szimulált adatsor

Ahhoz hogy GTM segítségével karakterizálhassuk a HEA-k belső feszültségterének eloszlását, a HEA-k belső feszültségterének megfelelő szimulációkon érdemes tanítani a GTM-et. A (2. fejezet) évrélése alapján kiderült, hogy HEA-k belső feszültségtere jó közelítéssel zéró várható értékű normális eloszlásnak felel meg:

$$P(\tau_{\text{pin}}, \Sigma_{\text{pin}}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\Sigma_{\text{pin}}^2}} e^{-\frac{\tau_{\text{pin}}^2}{2\Sigma_{\text{pin}}^2}}, \quad (5.1)$$

Ahol Σ_{pin} az eloszlás szórása. Tehát adott, hogy a szimulációkat normál eloszlásból (5.1. egyenlet) mintavételezett τ_{pin} belső feszültség tér megadásával futtassunk. Mivel a normál eloszlás jelen esetben csak annak szórásától függ, már csak az kérdéses, hogy az eloszlás szórása Σ_{pin} milyen tartománya felel meg a nagyentrópiás ötvözetekben találhatóékhoz. Ennek felderítése érdekében egy korábbi DDS szimulátorral dolgozó HEA tanulmány eredményeire alapozok [20]: A kutatás részeként, úgyszintén centrális normális eloszlású belső feszültségteret feltételezve a közeg folyásfeszültsége ($\sigma_{\text{folyás}}$) és a normális eloszlás szórása (Σ_{pin}) között az alábbi skálázási törvény tapasztaltak:

$$\sigma_{\text{folyás}} = \beta \cdot (\Sigma_{\text{pin}})^\gamma, \quad (5.2)$$

ahol $B \simeq 0.11$ és $\gamma \simeq 1.1$ -et találtak mely igen közel esik a qED modell által, 2 komponensű ötvözetre jósoltakhoz : $\gamma = 4/3$ [5]. Tehát amennyiben ismert a HEA-k folyásfeszültsége, úgy az itt vázolt összefüggés alapján meghatározható a kutatás céljából releváns Σ_{pin} tartomány. Több kísérleti kutatás alapján a nagyentrópiás ötvözetek szobahőmérsékleten diszlokációcsúszás hatására a $\sigma_{\text{folyás}} \in [100 \text{ MPa}, 300 \text{ MPa}]$ tartományon folynak meg [21]. A Cantor-ötvözetekre meghatározott nyírási modulus, $\mu_{\text{Cantor}} = 84 \text{ GPa}$ -al számolva [20] egy egyszerű osztás segítségével skálázható a folyásfeszültség a szimulációkból nyerhető értékekre. Az átváltásokat elvégezve, majd a (5.2. egyenlet) skálázást alkalmazva nagyságrendileg a $\Sigma_{\text{pin}} \in [0.01 \mu, 0.03 \mu]$ tartomány felel meg a nagyentrópiás ötvözeteknek. Az itt bemutatott skálázásnak megfelelően, minden további szimulációs feszültség értéket ($\Sigma_{\text{pin}}, \text{RMSE}$) a Cantor-ötvözetnek megfelelő nyírási-modulus μ_{Cantor} egységeiben értendő, továbbá minden szimulációs hosszmenyiség a Cantor-ötvözet (2.4. egyenlet)-ben megmutatott rácsparaméter egységeiben értendő.

Korábbi tanulmány [20] alapján a DDS szimuláció terhelésre vonatkozó **stress_rate** ($\Delta\sigma_{\text{külső}}$) és az elasztikus médium **spring_constat** (B) merevségi együtthatóját úgy vá-

lasztottuk meg, hogy szimuláció kvázi-statikusságát garantáljuk a $\Delta\sigma_{\text{külső}} \ll B \ll \sigma_{\text{folyás}}$ relációk biztosításával. A szimulációkhoz használt paramétereket a (2. táblázat) mutatja.

Mivel a diszlokáció vonal alakja és a belső feszültségtér szórása közötti összefüggés nem ismert, a Gépi Tanulási módszerrel való prediktáláshoz – a (3. fejezet)-ben részletesen ismertetett – több modellt is alkalmaztunk, így elkerülve az esetleges probléma-specifikus modellek alkalmazását. Továbbá a több modell vizsgálatának módszere információt nyújthat az összefüggés komplexitásáról. Az átfogó predikciós analízishez Lineáris Regresszort, K-legközelebbi-szomszéd modellt, Véletlen Erdő Regresszort és Hisztogram Gradiens Gyorsított Regresszort alkalmazunk.

A diszlokációk valós mintán belül különböző hosszal rendelkeznek a minta határainak és belső szimmetriáinak megfelelően. Ezért a tanításhoz több szélességű szimulációs teret vizsgáltunk, hogy lássuk a módszer diszlokációvonal hosszfüggésének univerzalitását. Ezek alapján a szimulációs rendszerszélesség: $L_x = \{50b, 100b, 150b\}$.

A szimulátor alapbeállításai alapján $\tau_{\text{külső}}^{\text{init}} = 0$ értékkel indítja a szimulációkat. Az (5.2. egyenlet) alapján ismert a rendszer folyásfeszültsége, így a szimulációk indításakor az ennek megfelelő $\tau_{\text{külső}}^{\text{init}}$ -t használva kihagyható a külső feszültség folyásfeszültségig fel-futó szakasza, mely a predikciók szempontjából nem tartalmaznak releváns adatot. A szimulációk függőleges kiterjedésének $L_y = 500b$ -t választottunk, ami tapasztalati úton elegendőnek bizonyul, hogy az egy szimuláció folyamán több „pinning–depinning” esemény számát biztosítsa.

Ahhoz, hogy – a már betanított GTM – minél nagyobb felbontással legyen képes meghatározni a belső feszültségtér szórását a fenti Σ_{pin} tartományon $\Delta\Sigma_{\text{pin}} = 10^{-3}$ lépésközt választottunk a tartomány felbontására. Minden Σ_{pin} értékhez 5 db, különböző $\tau_{\text{pin}}(x, y)$ belső feszültségtér generáltunk. Ennyi szimulációval Σ_{pin} értékenként biztosítható, hogy a tanítási adathalmaz és a teszt adathalmaz aránya – a GTM-ek esetében bevett – 80% : 20% arálynak feleljen meg. Az Σ_{pin} értékenkénti 5 szimuláció továbbá lehetőséget ad ötszörös keresztvalidáció technika elvégzéséhez, mely annyit jelent, hogy a teljes adathalmazt $k(= 5)$ részre felbontva, mindig 1-et hagyva validációs adathalmaznak, megtanítjuk és kiértékeljük a megfelelő validációs adathalmazon, majd ezt minden lehetséges kiosztás szerint kiértékeljük. Az így kapott GTM metrikákat, esetleg azok átlagát számítjuk ki ilyenkor. Ez a technika és a $\Delta\Sigma_{\text{pin}} = 10^{-3}$ felbontás így összesen 105 db szimulációt jelent rendszerméretenként. Tehát a kiértékelés és analízisek összesen 315 db egyedi szimuláció eredményén alapszanak.

5.2. Diszlokáció vonal jellemző reprezentációk

A GTM-ek egyik kiemelkedő tulajdonsága, hogy az emberi intuitív gondolatok alapján megfigyelt jellegzetességek alapján is jó eredményeket érnek el, ebből kifolyólag első diszlokációvonal jellemzőnek az ún. empirikus jellemzőket vettük. Ezen jellemzőket az alábbi felsorolásban részletezem azok jelentésével és – eredetileg angolul definiált – megnevezésével együtt.

Empirikus jellemzők

- **VE:** Vertikális kiterjedés (Vertical Extension): A diszlokáció vonal y koordináta szerinti legmagasabb és legalacsonyabb szegmense közötti y irányú távolság.

Paraméter	Jelentése	Érték
μ	Nyírási modulus	$\mu_{\text{Cantor}} = 84 \text{ GPa}$
b	Burgers-vektor hossza	$1 a_{\text{HEA}} = 0.33 \text{ nm}$
ν	Poisson tényező	0.35
B	Anyag merevségi együttható	$10^{-8} \frac{\mu}{b^2}$
$\Delta\sigma_{\text{külső}}$	Iteráció alatti külső feszültségnövekedés	$10^{-10} \frac{\mu}{\text{it}}$
$\tau_{\text{külső}}^{\text{init}}$	Kezdő külső feszültségérték	$0.11 \cdot \Sigma_{\text{pin}}^{1.1}$
vertical_burgers	A vízszintes diszlokáció szegmens karaktere	1
L_x	szimulációs tér vízszintes kiterjedése	$50 b, 100 b, 150 b$
L_y	szimulációs tér függőleges kiterjedése	$500 b$

2. táblázat. A szimulációk paramétereit, ahol a távolság a b Burgers-vektor egységeiben mérendő, a feszültség értékek pedig a μ nyírási modulus egységében értendő. Az „it” az iteráció rövidítése.

- **VED:** Vertikális kiterjedés szórása (Vertical Extension Deviation): A diszlokációszegmensek y koordinátájának szórása.
- **NOLE:** A lokális extrémumok számossága (Number Of Local Extrema): A diszlokációvonal menti összes extrémum pontok száma.
- **DEP:** A legnagyobb vertikális egybefüggő szakasz (Largest Contiguous Vertical Link): A leghosszabb végig függőleges vonalszakasz hossza.
- **AOH:** Vertikális linkek összegzett hossza (Area Overhang): A diszlokációvonal legalább $1 b$ -nél hosszabb egybefüggő vertikális szegmenseinek összege.
- **M2D:** Átlagos második derivált (Mean 2nd order Derivative): A diszlokációvonal x szerinti második deriváltjának abszolút értéke, majd annak átlagértéke. Ennek a reciprokát véve az átlagos görbültséggel megegyező mennyiséget kapunk.
- **EPAID:** Iteráció szerint normált végpontmagasság (Endpoint's Coordinates Scaled by Iteration id.): A diszlokációvonal végpontjainak(, melyeket az $x = 0$ és az $x = L_x$ pontokon értelmezhetünk) átlaga leosztva a szegmens fájl iteráció számával. Ez így egy kvázi diszlokációvonal átlag sebességgel azonosítható mennyiség.
- **LS:** Diszlokáció túlnyúlás (Length Surplus): Az eredeti szimulációs tér L_x szélességéhez mért diszlokáció szegmens szám többlet, ugyanis egyenes diszlokáció esetében a szegmens szám megegyezik a rendszerméret szélességével.
- **LDBLE:** Legnagyobb differencia lokális extrémumok között. (Largest Depth Between Local Extrema): A diszlokációvonal mentén egymást követő lokális extrémumok közötti legnagyobb y koordináta szerinti magasságkülönbség.

- **IAB:** Integrálás a bázisvonal körül (Integral Over Baseline): A diszlokáció $y - \langle y \rangle_x$ szerinti integrálja, ahol $\langle y \rangle$ az y várható értéke.
- **BB:** Körbezáró doboz (Boundary Box): A legkisebb, a diszlokációvonalat teljesen magába foglaló téglalap területe

Fourier-jellemzők Az intuitív, geometriai jellemzőkön túl, vehetünk 1 dimenziós jelek szisztematikus leírására alkalmas jellemzőt. Erre a célra választottuk a diszlokációvonalnak Fourier-transzformáltjának komponenseit. A diszlokációvonal diszkrét mintavételezésű adatsor, így annak Fourier-transzformálásához diszkrét Fourier-transzformációt kell alkalmazni. Vegyük tehát a diszlokációvonal leírására a $h(x)$ függvényt, ahol $x = 1, 2, \dots, L_x$. Az így definiált függvényalakra diszkrét a Fourier-transzformáció:

$$\hat{h}_k = \frac{1}{L_x} \sum_{n=0}^N h_n \cdot e^{-ikn} \quad k = \frac{2\pi}{L_x} \cdot m, \quad m \in [0, L_x - 1], \quad (5.3)$$

ahol k -t azonosíthatjuk a diszlokációvonal hullám-szuperpozíció felírásának hullámszámával. A diszkrét Fourier-transzformációnak fontos következménye, hogy az eredeti jel mintavételezésének felénél kisebb felbontásnál részletesebb információt nem képes a transzformáció felbontani, ez a Shannon–Nyquist-tétel [22]. Ez azt jelenti, hogy az $\frac{2\pi}{L_x} \cdot \frac{L_x}{2} = \pi$ -nál nagyobb hullámszámú komponensek nem tartalmaznak további információt. Az így elért Fourier-komponensek komplex számok $\hat{h}_k \in \mathbb{C}$. Ennek kiküszöbölése érdekében a Fourier-komponensek abszolút értékét vesszük, azaz $|\hat{h}_k|$, mely a komplex vektor hosszának is nevezhető, tehát valós, skaláris szám ($|\hat{h}_k| \in \mathbb{R}$). A GTM-ek tanításához tehát a diszkrét Fourier-komponensek abszolút értékét használtuk fel.

5.3. Modell kiértékelés

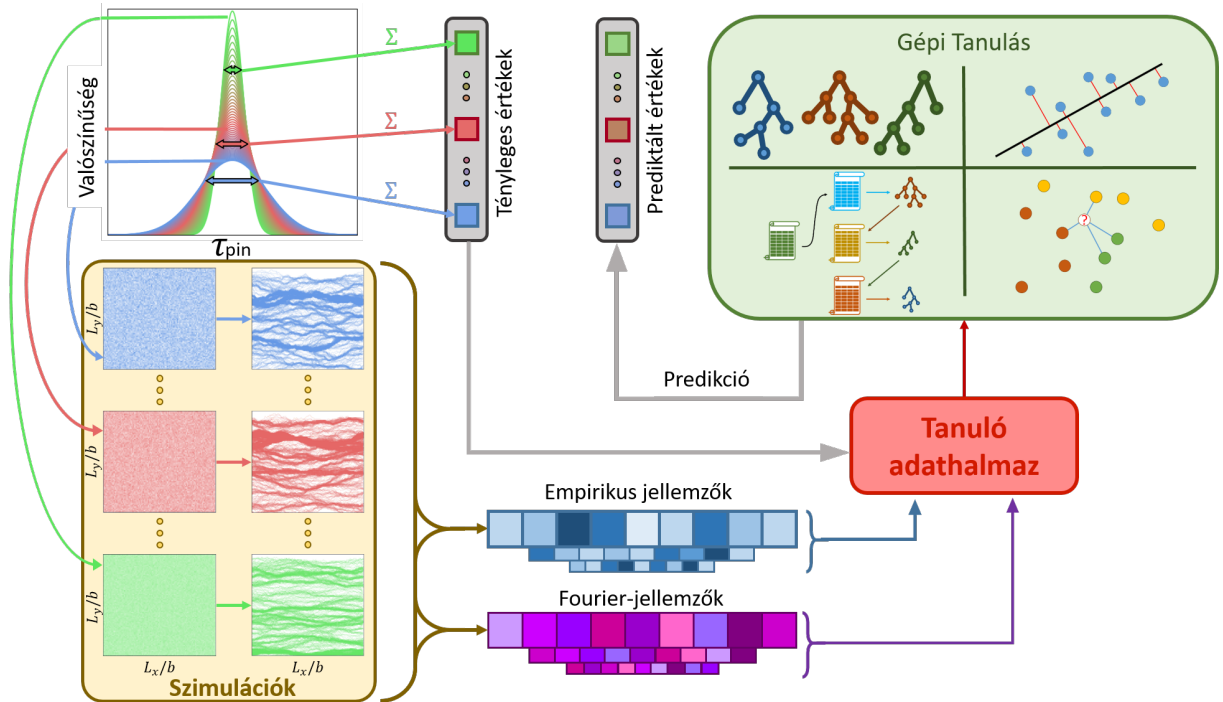
A Gépi Tanulási Módszerek tanításához tehát három rendszerméretre kiterjedően, $L_x \in \{50b, 100b, 150b\}$, $L_y = 500b$, a belső feszültségtérnek $\Sigma_{\text{pin}} \in [0.01\mu, 0.03\mu]$ tartományán $\Delta\Sigma_{\text{pin}} = 0.001\mu$ lépésközzel szimulációs adatot generáltunk. Továbbá minden Σ_{pin} értékhez még további 4 azonos szimulációs paraméterekkel, de –a pseudo-véletlen normális eloszlás mintavételezésében– különböző belső feszültség térrel szimulációt futtattunk. Az így generált szimulációk váltakozó ideig futottak, vagyis a szimulációnkénti nyert adat mennyisége is különböző. Ezen ok miatt tehát nem egyenletes eloszlású a GTM-nek szolgáltatott adathalmaz Σ_{pin} szerint. A GTM tanítása során nem probléma a célparaméter szerint váltakozó adatmennyiség, azonban a kiértékelés során a teszt adathalmazon elért R^2 -vel és RMSE-vel mért teljesítménye függ ezen inhomogenitástól. Annak érdekében, hogy a GTM-ek predikciós teljesítménye összehasonlítható legyen rendszerméreteken keresztül, szükséges a teszt halmaz homogenizálása Σ_{pin} szerint, ahol a homogenitás annyit jelent, hogy Σ_{pin} -hez ugyanannyi adatot rendelünk⁵. A kiértékelés folyamán minden keresztvalidáció esetre biztosítottam ezen követelményt.

⁵A homogenizáló algoritmus, megkereste azt a Σ_{pin} -t melyhez a legkevesebb adat tartozik, majd minden másik Σ_{pin} -hez tartozó adatot leszűkített úgy, hogy azok megegyezzenek a legkisebb adathalmaz számosságával. A szűkítés folyamán minden Σ_{pin} értékhez tartozó adatot véletlen módszerrel összekevertem.

A legtöbb Gépi Tanulási modell számára kedvező az adathalmaz standardizálása, mely során a következő transzformációt végezzük el:

$$\mathbf{X} = X_j^i \Rightarrow \hat{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle_j}{\sqrt{\text{Var}(\mathbf{X})_j}} \quad j = 1, \dots, J \quad i = 1, \dots, N, \quad (5.4)$$

ahol $\langle \mathbf{X} \rangle_j = \frac{1}{N} \sum_i X_j^i$, továbbá $\text{Var}(\mathbf{X})_j = \frac{1}{N} \sum_i X_j^{i^2} - \langle \mathbf{X} \rangle_j^2$. Itt az i index az adatpontokon fut végig, ahol N adatpont van összesen, j index pedig a jellemzőkön fut végig, ahol J a jellemzők számossága. A standardizált adat átlaga 0, szórása 1. Minden adathalmazt standardizáltam tanítás előtt.



5.1. ábra. A szimulált diszlokációvonal jellemzői alapján tanított GTM-ek tanításának és predikciójának munkamenete sematikusán ábrázolva.

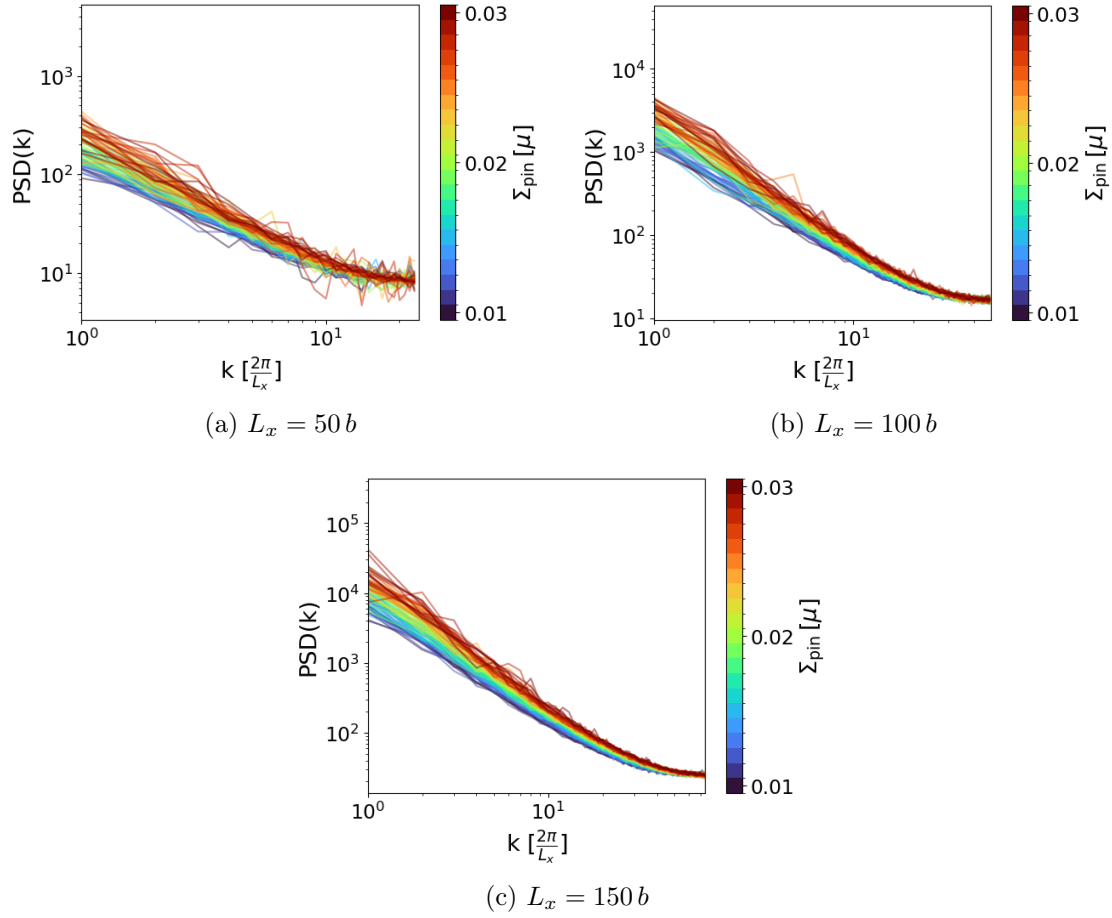
5.4. Jellemző-analízis

A jellemzők későbbi kiértékelése szempontjából érdemes azokat a gépi tanulási módszerektől külön, csak a jellemzők és célparaméter közötti összefüggéseket vizsgálni.

Fourier-jellemzők

A Fourier-jellemzőket a spektrális sűrűségeen keresztül érdemes a a célparaméterhez viszonyított kapcsolatában vizsgálni. A teljesítmény spektrális sűrűséget a Fourier-együtthatók abszolút érték négyzetének átlagértéke adja, $\text{PSD}(k) = \langle |\hat{h}_k|^2 \rangle$. Itt az átlagolást a teljes szimulációra értve kell tekinteni.

Az ábrák alapján jól kirajzolódik, hogy I) a görbült diszlokációvonalnál várt kis hullámszám komponensek (amelyek nagy hullámhossznak felel meg) dominánsabbak, míg a



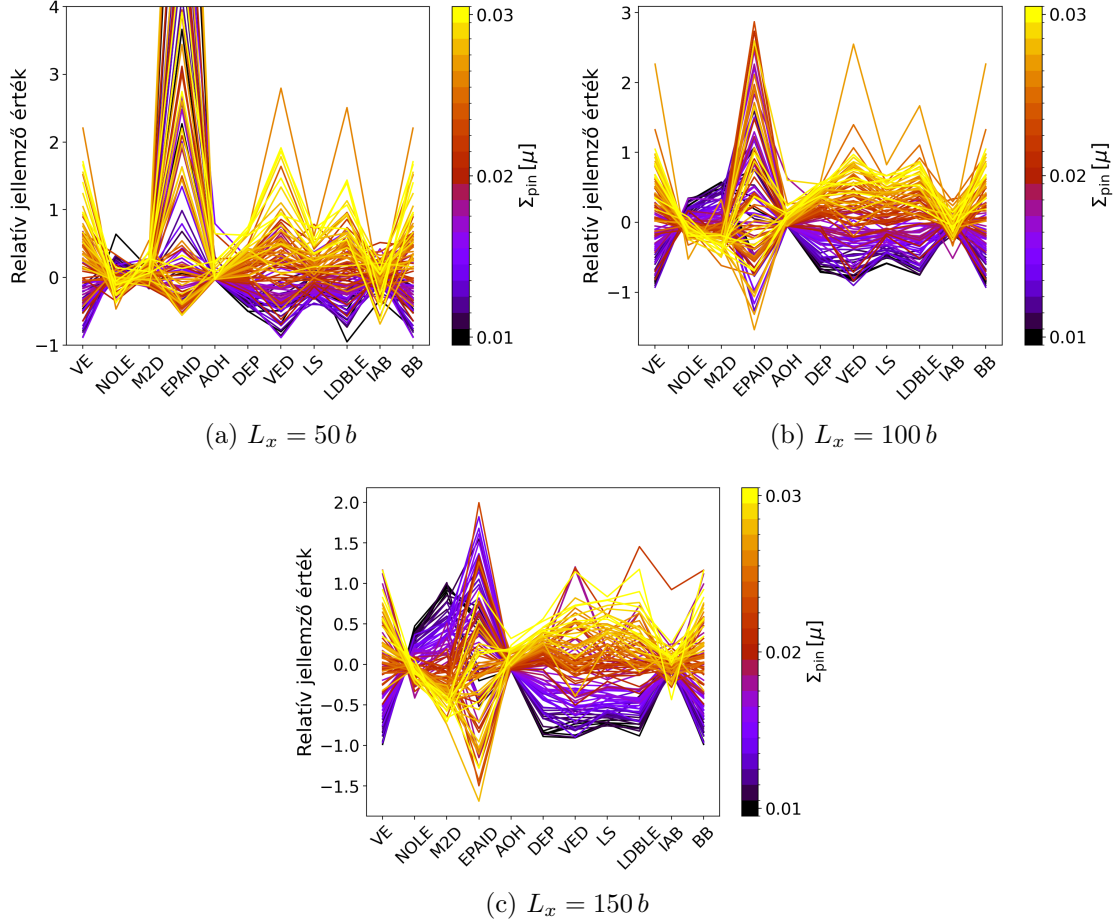
5.2. ábra. A három rendszerméretre számított teljesítmény spektrális sűrűsége. (10^4 -es mintavételezés mellett.)

nagy hullámszámok esetében a részben a véletlen dinamikából következő zajhoz kapcsolódó komponensek lecsengenek. II) Kifejezetten jól látható, hogy a rendszerméret növelésével erősödnek a kis hullámszámhoz tartozó komponensek, melyek jól összeegyeztethetőek azzal az alapvető elképzeléssel, miszerint a szélesebb rendszerben mozgó diszlokáció jobban kigömbül. Továbbá az ábrák alapján kimutatják, hogy a kis hullámszámú komponensek esetében kellően jól elkülönülnek egymástól a különböző Σ_{pin} értékű $\text{PSD}(k)$ görbék, a Fourier-jellemzők alapján a különböző Σ_{pin} értékekhez tartozó szimulációkhoz tartozó diszlokációvonalak valóban más mértékben gömbülnek. Ezek alapján a Fourier-komponensek alkalmas jelöltek a diszlokációvonalak alakján alapuló predikcióban történő felhasználásra.

Empirikus jellemzők

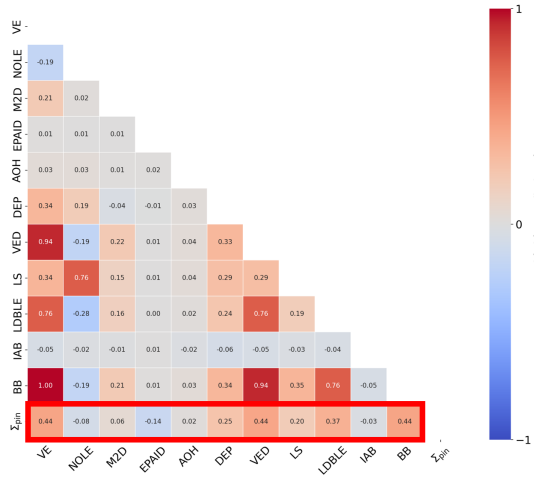
Az empirikus jellemzők könnyen számíthatók és jól kezelhetők. Az előző alfejezetben bemutatott – Fourier-jellemzőkre vonatkoztatott teljesítmény spektrumhoz hasonló – a jellemzőkénti Σ_{pin} szerinti eltéréseket bemutató mennyiséget lenne érdemes az empirikus jellemzőkre kiszámítani. A szimulációkénti átlagos jellemző értékek megfelelően bizonyulnak a belső feszültségtér és a diszlokációprofil kapcsolatának összekötésére. A jel-

lemzők összehasonlítása érdekében a teljes $\mathbf{X}_{\text{Emp}}$ empirikus jellemzőket tartalmazó adathalmaz helyett annak $\hat{\mathbf{X}}_{\text{Emp}}$ standardizált változatára számítottam ki a szimulációnkénti átlag értéket. A (5.3. ábra) ezen mennyiségeket mutatja.

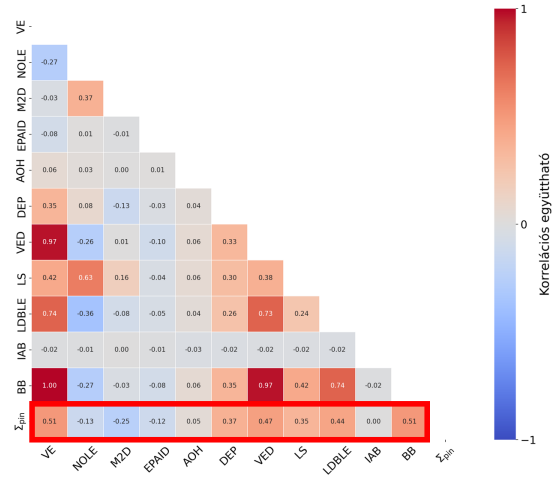


5.3. ábra. Három rendszerméretre számított szimulációnkénti átlagos standardizált jellemző érték, ahol az egy szimulációhoz tartozó jellemzők a szimulációhoz tartozó Σ_{pin} szerint vannak színezve. (10^4 -es mintavételezés mellett.)

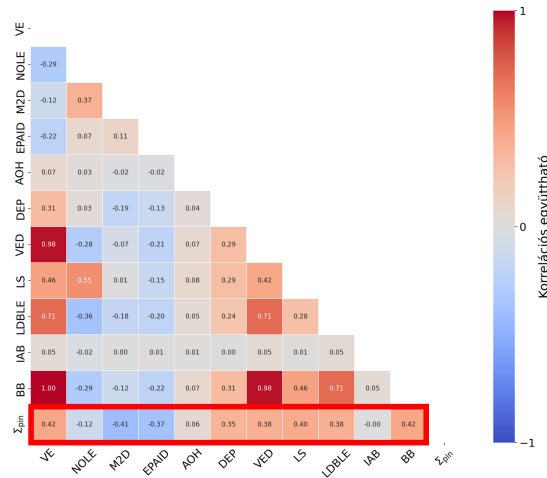
A gépi tanulási módszerek tanítása szempontjából azt a jellemzőt nézhetjük relevánsnak, melynek átlag értékei Σ_{pin} szerint monotonan más-más értéket vesznek fel. A (5.3. ábra) alapján a definiált empirikus jellemzők közül többségük mind relevánsnak tekinthető, kivétel ez alól a AOH, IAB jelölésű jellemzők, mivel közel azonos értéket vesznek fel Σ_{pin} színekód szerint, tehát ezen jellemzők feltételezhetően kisebb járulékot adnak a predikció teljesítményéhez. Ezen megfigyeléseket jól alátámasztja a megfigyelhető alacsony korreláció Σ_{pin} értékével (5.4. ábra). A korrelációs táblát figyelembe véve megfigyelhető, hogy a VE és a BB jellemző ugyanazon korrelációs együtthatóval bírnak minden további jellemző-vel összepárosítva. Ennek alapján nem valószínű, hogy ezen két jellemző együttes használata információ többletet biztosítana a GTM-nek. Minden jellemző esetében a jellemző relevanciájától függetlenül látszik, hogy a rendszerméret növekedésével azok egyre jobban megkülönböztethetőek Σ_{pin} függvényében (5.3. ábra).



(a) $L_x = 50b$



(b) $L_x = 100b$



(c) $L_x = 150b$

5.4. ábra. Az empirikus jellemzők és a Σ_{pin} célparaméter közötti korrelációs táblák mind a három rendszerméret esetében. A piros keret hangsúlyozza a Σ_{pin} -hez tartozó korrelációs együtthatókat.

6. Eredmények

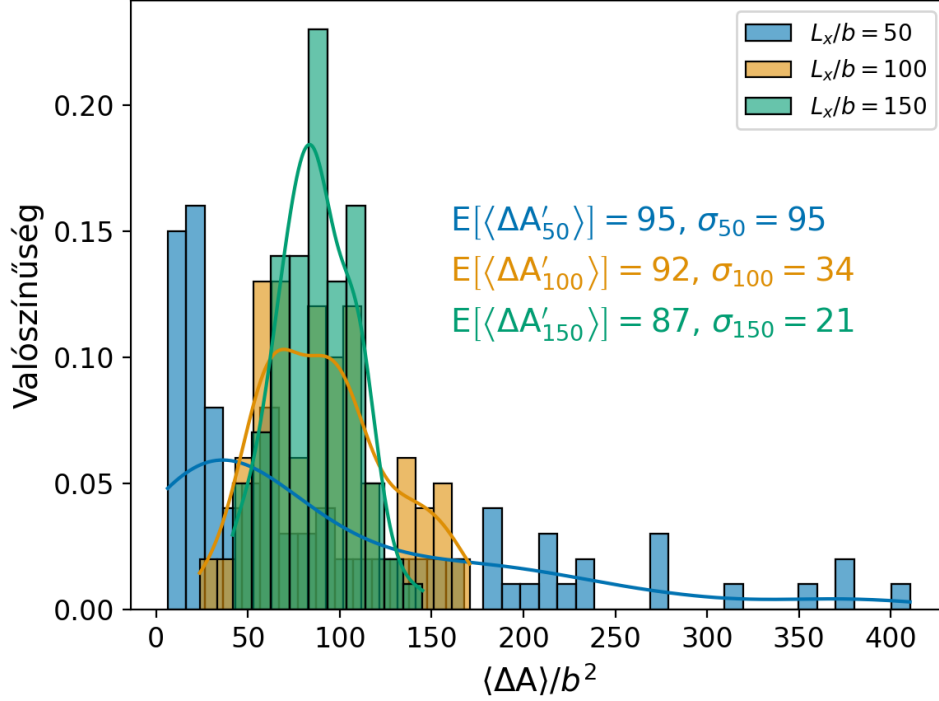
A szimulációs eredményeket érdemes rendszerdinamikai szempontból megvizsgálni. Mivel a szimuláció random dinamikán alapszik, így a külső (egyirányú) feszültségtér és a random belső feszültségtér mellett egyrészt a diszlokáció vonal alakja zajos, másrészt a diszlokációvonal y irányú haladásának sebessége változó. Ahhoz, hogy a diszlokáció vonal a szimulációs térben legalább egy egységet előre haladjon, több, a rendszer L_x méretével összehasonlítható számosságú iteráció szükséges. Az $L_x = 100b$ rendszer méretű szimuláció esetében ahhoz, hogy a diszlokációvonal $\Delta y_{d.v.}^6 = b$ mértékben haladjon előre, legalább 100 iteráció szükséges. Ez az eset akkor fordulhat elő, ha a diszlokációvonal minden szegmensre az összes feszültségtér szerint kedvezőnek érzékeli az $\Delta y_{szegmens} = b$ előrehaladást, valamint mindegyik szegmensre pont egyszer választjuk. Mivel szimulációinkat szándékosan véletlenszerű belső feszültségtérrel látjuk el, így az átlagos iterációs szám a $\Delta y_{d.v.} = b$ előrehaladáshoz mindenképpen több mint 100. A szimulátor beállításai alapján a diszlokációvonal alakjáról 100 iterációnként ment adatot. Ilyen nagy felbontásban nem érdemes az adatot GTM-nek szolgáltatni, ugyanis csak a random dinamikából származó fluktuáció változásáról ad információt. A megfelelő adat biztosításához meg kell keresni azt az iterációs számot, ahol a diszlokációvonal átlagosan előrehalad $\Delta y_{d.v.} = b$ -t. Az analízis alapján 10^4 iteráció során mind a három vizsgált rendszer méret esetében közel $\sim 100b^2$ felületet sűröl a diszlokációvonal. Ezt a (6.1. ábra) demonstrálja. Az $L_x = 100b$ rendszer esetében ez pont azt jelenti, hogy $\langle \Delta y_{d.v.} \rangle \simeq b$. Ilyen mintavételezést választva átlagosan minden y értékéhez lesz legalább egy diszlokációvonal. Természetesen egy adott magassághoz számos esetben így is több diszlokáció vonal alak rögzül, hiszen egyes pontokon a random háttér feszültségtér hatására a diszlokációvonal megragad. Tehát a 10^4 -es mintavételezés kellően alacsony felbontásnak bizonyul.⁷

A 10^4 szerez mintavételezés mellett előállított (empirikus és Fourier) diszlokációvonal-jellemzők kombinációja alapján GTM algoritmustól lényegében függetlenül $RMSE \simeq 4,38 \cdot 10^{-3}$ és $R^2 \simeq 0.45$ teljesítményt értek el a modellek a teszt adathalmazon (6.2. ábra). A $\Sigma_{pin}^{pred.}$ predikciókat ábrázolva a hozzájuk tartozó tényleges $\Sigma_{pin}^{tls.}$ értékek függvényében, azok egyértelműen pozitív korrelációt mutatnak, tehát a modellek képesek felfedezni a diszlokációvonalalak és az azt befolyásoló belső feszültségtér közti kapcsolatot. A modellek itt megfogalmazott sikerességének ellenére a GTM teljesítményét jellemző metrikák és 6.2.a), 6.2.b), 6.2.c) ábrák alapján egyértelműen kiolvasható, hogy a predikciók nem kellően pontosak.

Eddig a pontig a szimulációkból származtatott adatokon tanított GTM-ekkel egy darab (izolált) diszlokációvonal alapján kaptunk predikciót a diszlokáció környezetében uralkodó belső feszültségtér szórásáról. Fontos kiemelni, hogy a bemeneti adat, azaz a diszlokációvonal nagy mértékű zajt tartalmaz [ahogy azt az (5.2. ábra) is mutatja], ennek következtében a GTM annak tanítása folyamán a fluktuációról is kap információt. Következésképpen az így tanított GTM predikciója természetesen tartalmazni fogja a megtanult zajból származó tévedést is. A fluktuáció a szimulációdinamikából származik így az abszolút nem áll kapcsolatban a belső feszültségtér szórásával, tehát a GTM-nek olyan információt szolgáltatunk, mely a Σ_{pin} pontos prediktálása szempontjából teljes mértékben fölösleges. Ezek alapján célszerű a fluktuáció csökkentése, amennyiben lehetséges, teljes

⁶d.v. := diszlokáció vonal

⁷Sűrűbb mintavételezés választással nem tapasztalható számottevő változás a tanulás mértékében.

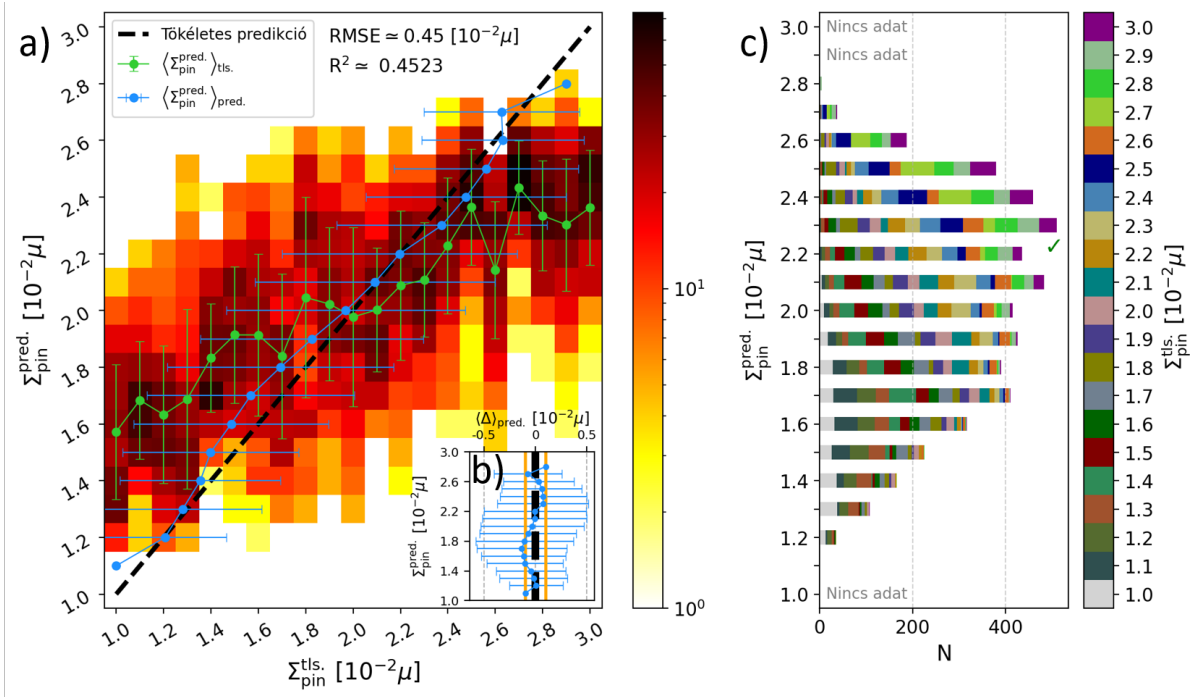


6.1. ábra. A szimulációk 10^4 mintavételezéssel számított $\langle \Delta A \rangle$ átlagos diszlokáció vonal csúszás szerinti eloszlása. Ezen átlagértékek a szimuláció méret szerinti 105 db szimulációra vett átlagok, azaz az átlagolás szimulációnként értendő. Az ábrán az eloszlások $E[\langle \Delta A'_{L_x} \rangle]$ várható értéke (ahol $\Delta A' = \Delta A/b^2$) és szórása is fel van tüntetve rendszer méret szerint. Az ábra alapján jól látható, hogy mind a három rendszer méret esetében $\approx 100b^2$ területet súrol a diszlokáció. Ez $L_x = 50b$ esetében $\langle \Delta y_{d.v.} \rangle \approx 2b$ átlagos előrehaladást, míg $L_x = 100b \rightarrow \langle \Delta y_{d.v.} \rangle \approx 1b$ és $L_x = 150b \rightarrow \langle \Delta y_{d.v.} \rangle \approx \frac{2}{3}b$. Az ábrán megfelelő színnel behúzott görbék az eloszlások kernel sűrűségbecslései.

megszüntetése.

Ez idáig a 10^4 iterációs mintavételezés következményeként minden rögzített adatpont között további 100 adatpont lett kihagyva. A kihagyott adatpontokat is vegyük figyelembe, másképp szólva növeljük a mintavételezés sűrűségét 100 iterációra. A megnövekedett számú diszlokációvonalakra továbbra is számítsuk ki a jellemzőket, azonban mielőtt azokat a GTM-nek szolgáltatnánk minden **egymás követő 100** – ugyanazon szimulációhoz tartozó – jellemzőt átlagoljuk ki, így összességében a GTM-nek ugyanakkora adatmennyiséget szolgáltatva. Ennek következményét a (6.3. ábra) mutatja be. Az ábrán jól láthatóan mind az R^2 , RMSE nagymértékben javult az eddigi technikával elért tanításhoz képest. Azzal, hogy a 10^4 -es mintavételezési adatpontok közötti adatpontokat is belevettük a jellemzők kalkulációjába további információt nyertünk a köztes diszlokációvonalak változásáról, miközben az átlagolás technikája a véletlen fluktuációt kiküszöbölte.

A (6.3. ábra) átfogó betekintés nyújt az átlagolással való predikciók teljesítmény javításába. Az ábra alapján egyértelműen javult minden aspektusa a teszt-validációnak: I) A kétdimenziós hisztogram mintázata számottevően jobban illeszkedik a tökéletes egyezést reprezentáló 45° szögmeredekségű lineáris vonalhoz. II) Az R^2 duplájára nőtt, míg az RMSE felére csökkent ami kétszer olyan jó teljesítményt jelent az átlagolás nélküli



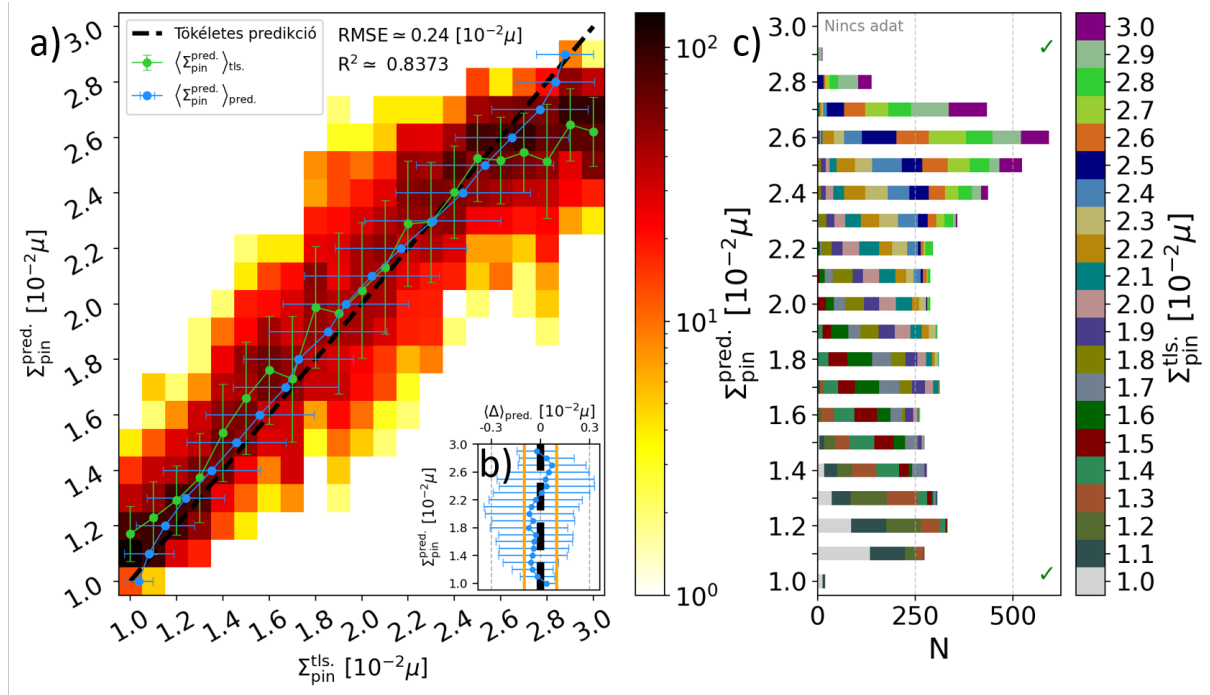
6.2. ábra. 10^4 iterációnként mintavételezett, empirikus és Fourier-jellemzők alapján tanított GTM (RFR) teljesítményének bemutatása. **a)** A modell predikciója és a tényleges értékek között megfeleltethetőség jószágát a kétdimenziós $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ - $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}}$ hisztogram mutatja be. Az ábrán a zöld vonal mutatja a (folytonos) predikciók (diszkrét) $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}}$ szerint felbontott átlagértékét és annak szórását. A kék vonal mutatja a (folytonos) $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ predikciók – a tényleges diszkrét értékek felbontását alkalmazva a folytonos predikciók tartományára – átlagát és szórását. **b)** Az átlagos predikció és a tényleges érték közötti differenciát mutatja a predikciós érték függvényében, ahol $\langle \Delta \rangle_{\text{pred.}} = \Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}} - \langle \Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}} \rangle_{\text{pred.}}$. **c)** $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ predikciók eloszlása az adott $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}}$ érték esetén. Az ábrán a zöld pipa jelzi, ha a $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ felbontási tartományon belül a predikciónak megfelelő tényleges $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}}$ a legdominánsabb. A 'Nincs adat' felirat a predikció hiányát jelzi a megfelelő felbontási tartományra vonatkoztatva.

GTM-mel elért metrikák. III) A kategorizált átlagokat és szórásukat reprezentáló zöld és kék vonalak egyaránt jobban közelítenek a tökéletes predikcióhoz (fekete szaggatott vonal). IV) A 6.3.c) ábrán bemutatott $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ értelmezési tartományon jobban széteszlik, míg adott $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{tls.}}$ esetében $\Sigma_{\text{pin}}^{\text{pred.}}$ kevésbé fluktuál.

Az átlagolás eredményességét érdemes átfogóbban megvizsgálni, figyelembe véve a rendszerméret függést, a GTM modell megválasztásától és a választott reprezentációktól való függést. Ennek érdekében a következő alfejezetben ezen különböző aspektusok hatását mutatom be.

6.1. Egymást követő diszlokációvonalak kvázi átlagolása

Az eddigiek alapján tisztán látható, hogy az átlagolásnak rendkívül jó javító hatása van a predikcióra. Az alcímben feltüntetett „kvázi” jelző arra utal, hogy az egymást követő diszlokációvonalak szegmens pozíciója helyett a diszlokációvonalból kiszámított jellemző-



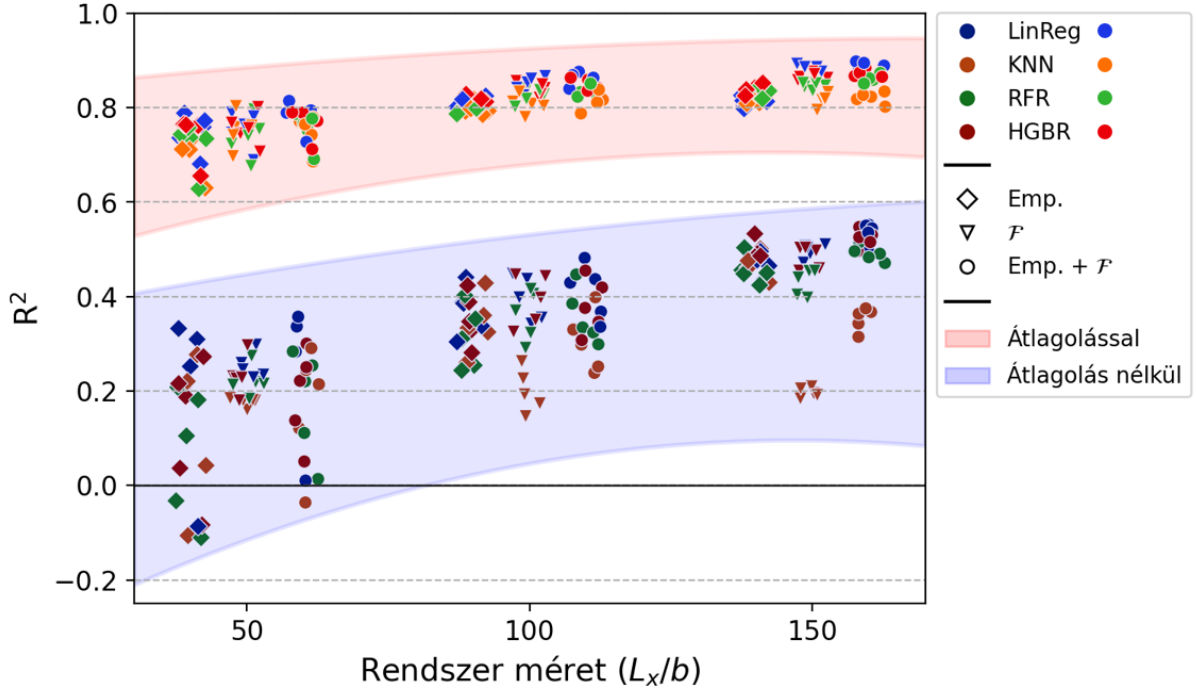
6.3. ábra. 100 iterációnként mintavételezett, empirikus és Fourier-jellemzőket egymást követő 100 mintavételezésen átlagolt adat alapján tanított GTM (RFR) tesztvalidációs ábrája. Az ábra értelmezéséhez a (6.2. ábra) képaláírása szolgál útmutatást.

ket átlagoljuk össze. Ennek jelentős előnye, hogy a számított adatmennyiség diszlokációvonalanként egyezik, ugyanis a szegmens szám – a terhelés alatt lévő rendszer természetéből adódóan – nem megmaradó mennyiség a szimuláció során. A diszlokációvonalra vonatkoztatott átlagolás emiatt rendkívül komplikált lenne.

Az átlagolás predikciójavító hatásának vizsgálatához széles körű analízist végeztem. A definiált két jellemző-reprezentáció és a kettő kombinációjának használatával mindhárom rendszerméretben a választott négy regressziós GTM-t keresztvalidációs technikával tanítottam. Ezután a modelleket a keresztvalidációnak megfelelő teszt-adatsoron elért predikcióból számított R^2 alapján hasonlítom össze, melynek eredményét a (6.4. ábra) mutatja be.

Az **átlagolás nélküli** GTM teljesítményekre jellemző, a rendszerméret növelésével jobb és jobb R^2 értékeket érnek el a modellek jellemző reprezentációtól függetlenül. Ez a jelenség jól magyarázható a jellemző analízis során kimutatott fluktuáció rendszerméret szerinti csökkenő tendenciájával. A rendszerméret függvényében az átlagolás nélküli empirikus jellemzők teljesítménye kifejezetten javul miközben a keresztvalidációs teljesítmény halmazok szórása is csökken. Ezzel párhuzamosan a nem átlagolt Fourier-jellemzők esetében az általános javulási tendencia úgyszintén látható. A KNN modell teljesítmény-ingadozásától eltekintve a Fourier-jellemzők is egyre kisebb szórással teljesítenek. A jellemzők kombinációjának teljesítménye a rendszerméret függvényében jól mutatja, hogy a modellek nem képesek „kizárni” az egyes individuálisan rosszabbul teljesítő jellemzőket. A KNN-től eltekintve minden modell stabilan, egymáshoz képest azonos performanciával bírnak.

Az **átlagolt** jellemzők teljesítményét vizsgálva az átlagolás nélküli tendenciához képest



6.4. ábra. Átlagolás nélküli és minden 100 egymást követő mintavételezés szerint átlagolt keresztvalidációk kollektív R^2 teljesítmény analízise, mely magába foglalja a rendszer méretfüggést, a GTM modell és a jellemző reprezentáció választás hatását. Az ábra az egyes validációk R^2 teljesítmény értékét mutatja be. A vízszintes tengelyen olvasható le a rendszerméret. Minden rendszermérethez három oszlop tartozik, mely a jellemző-reprezentáció megválasztása szerinti bontást mutatja. A színek kódolják a négy GTM modellt, mely színnek a kvázi átlagolás és az átlagolás nélküli esetekben csakis árnyalatban különböznek. Világos árnyalatok: kvázi átlagolás alkalmazásával elért teljesítmény, sötét árnyalatok: átlagolás nélküli tanítások. Az ábrán a kék és a piros tartomány a két módszer által elért teljesítmények közötti különbségét nyomatékosítja. $L_x = 50b$ rendszerméret mellett tanulás nélküli empirikus jellemzőkkel tanított LinReg egyik keresztvalidációs kombináció esetében $R^2 \simeq -0.6$ teljesítménnyel, illetve ezt a teljesítményt a kombinált jellemző tanulás eredményére is származtatta. Ezen két eset nem számottevő és nem reprezentatív a teljes analízis szempontjából így az ábrán nem jelöltem. (Az „átlagolás nélküli”–„átlagolással” tartományok önkényesen, azok különbségének hangsúlyozását szolgálják.)

gyengébb javulást tapasztalunk a szimulációs rendszerméret növekedésével. Az empirikus és Fourier-jellemzők egyaránt jobb és kevésbé ingadozó R^2 értékkel teljesítenek a rendszerméret függvényében. A jellemzők kombinációja azonosan jól teljesít. Megfigyelhető, hogy az átlagolás GTM teljesítmény-növelő hatása univerzális, mind rendszerméret, mind GTM modell és mind reprezentáció-választástól függetlenül. Az átlagolást alkalmazó és átlagolás nélküli modellek teljesítménye erősen elválk, ami a vörös és kék tartományokkal van kiemelve a 6.4. ábrán. Továbbá a teljesítmények modell függésében nem látható kitüntetett algoritmus, mind a négy modell nagyságrendileg azonosan jól teljesítenek.

A **GTM modellek** szempontjából vizsgálva a (6.4. ábra)-át általánosan jól teljesít a két döntési fa alapú regresszor, mely várható volt a döntési fák általános probléma megoldó képességüket tekintve. Különös eredménye az analízisnek, hogy a lineáris regresszor

minden vizsgált aspektus szerint hasonlóan teljesít a többi modellhez képest. Ez azt jelentheti, hogy a diszlokációvonal lehetséges jellemzői és a HEA-k belső feszültségterének szórása közötti kapcsolat lineáris.

A (6.4. ábra) alapján legfőbb tanulságként a következőket vonhatjuk le: I) A szimuláció rendszerméretének növelésével stabilabb és jobb GTM teljesítmény érhető el. II) Az empirikus és a Fourier-jellemzők külön is alkalmasak a belső feszültség jóslására. III) Jellemző reprezentációk közül a szisztematikus Fourier-jellemzőkkel általánosan jobb teljesítményre képesek a GTM-ek. IV) A jellemző reprezentációk kombinációja további teljesítmény növekedéssel járhat, de a GTM-ek nem képesek szűrni a nem megfelelő jellemzőket, ezzel esetenként rosszabb teljesítményt érve el, mint a megfelelő jellemzőn elért teljesítmény. V) A jellemzők átlagolás drasztikusan javítja a GTM-ek teljesítményét, melynek eredményül stabil $R^2 \approx 0.9$ értékre képesek.

A GTM-ek teljesítményét tanulságos az individuális jellemzők szemszögéből megvizsgálni, ezért a következő alfejezetben variációs módszerrel kimutatott eredményeinkre térek ki.

6.2. Jellemző analízis

Jellemző kombinációs módszer: A jellemzők relevanciájának mérésére néhány algoritmus scikit-learn implementációja külön `method`-dal rendelkezik (pl.: LinReg, RFR), azonban ezek általában nem összeegyeztethetőek modellek között, illetve nem minden modell rendelkezik ilyen beépített mérőszámmal. Ezen probléma megoldására alkalmas módszer minden lehetséges jellemző kombinációt megvizsgálni, minden lehetséges jellemző darabszám mellett. Minden ilyen lehetséges esetben a modellt megtanítjuk a jellemzők adott részhalmazán, majd a teszt halmaz azonos jellemző-részhalmazán validáljuk. A módszer elvégzése eredményül minden lehetséges jellemző kombinációra ismerjük a modell teljesítményét így átfogó képet biztosítva a modellek jellemző darabszám szerinti teljesítményéről. Tegyük fel, hogy N db jellemzőnk van összesen. Adott k jellemzőszám esetében, tehát k darab jellemzőt választunk N darab jellemzőből úgy, hogy a jellemzők sorrendjét vesszük figyelembe. Ez az ismétlés nélküli kombináció, ahol a különböző kombinációk száma:

$$C_N^k = \frac{N!}{k! \cdot (N - k)!}. \quad (6.1)$$

Amennyiben minden jellemző darabszám esetére felírjuk a különböző kombinációk számát:

$$C = \sum_k C_N^k = \sum_k \frac{N!}{k! (N - k)!} = 2^N. \quad (6.2)$$

Itt az utolsó egyenlőségénél felhasználtuk a Binomiális tételt. Ezzel megkaptuk a N jellemzőt tartalmazó halmaz összes részhalmazát tartalmazó halmaznak (azaz hatványhalmaznak) a számosságát. Ez tartalmazza az üres halmazt is, ha csak olyan részhalmazokat vesszünk, amelyekben legalább egy jellemző van, ezek számossága nyilvánvalóan

$$C' = C - 1 = 2^N - 1 \quad (6.3)$$

Ezek alapján közelítőleg exponenciálisan függ a kombinációk száma az jellemzők számától. Empirikus jellemzők esetében ez a szám: $N_{\text{Emp.}} = J_{\text{Emp.}} = 11$, mellyel az összesített kombinációk száma: $C'_{\text{Emp.}} = 2^{11} - 1 = 2047$. A leglassabb használt modell tanulási sebességével számolva 10^4 -es mintavételezésű adathalmazon, egy tanulást $T_{\text{tanít}} \approx 5 \text{ s}^8$ alatt végzett el. Az összes lehetséges kombinációt ezek alapján $T_{\text{össz.}} \approx 2,84 \text{ h}$ alatt végezné el, mely még kivitelezhető időtartam. Fourier-jellemzők esetében a legkisebb rendszer esetében is $L_x = 50 \text{ b} \Rightarrow N_{\mathcal{F}} = 25$, azaz $C'_{\mathcal{F}} \simeq 33,5 \cdot 10^6$ kombinációnak felel meg. A leggyorsabb használt modell tanulási sebességével kalkulálva a tanulási idő: $T_{\text{tanít}} \approx 0.1 \text{ s}$. Ezek alapján az összes lehetséges kombinációt az algoritmus $T_{\text{össz.}} \approx 39$ nap alatt végezné el, mely ezen dolgozat kereteibe nem fér bele. Fourier-jellemzők esetében egy egyszerűsített módszert végzek el a legalkalmasabb jellemzők analíziséhez, ezt a módszert majd a (6.2.2. fejezet)-ben mutatom be.

6.2.1. Empirikus jellemzők

Az jellemző-kombinációs analízist átlagolás nélkül és átlagolás mellett is elvégeztem. A teljes kombinációs halmazból adott számú jellemző mellett a legjobb teljesítményt (R^2) elérő kombinációkat szűrtem ki. Ezen szűrés alapján külön ábrázoltam az elért legjobb teljesítményeket a jellemzők darabszámának függvényben, illetve adott jellemző számhoz tartozó legjobb jellemző kombináció térképét. Az analízist az $L_x = 100 \text{ b}$ rendszerméreten végeztem el, mely már fényt derít az empirikus jellemzők viselkedésére. (6.5. ábra)

Átlagolás nélkül Az analízis alapján egyértelműen kirajzolódik, hogy minden modell képes egyetlen (jól megválasztott) jellemző alapján is megtalálni a Σ_{pin} -el fennálló kapcsolatot, illetve mindegyik modell teljesítménye szaturálódik 4–6 jellemző darabszám környékén. Ezen küszöb átlépése után további jellemzők hozzávétele nem jelent jelentős teljesítmény járulékot. Az egy jellemzővel való tanulás esetében a LinReg modell kivételével mind a VE jellemzővel tanult a legjobban, míg a LinReg modell a BB jelzővel. Most vegyük figyelembe a szaturáció határát képző (6.5c. ábra) ~ 6 jellemző darabszám vonalát, ami már tartalmazhatja a legrelevánsabb jellemzőket a korábbi érvelések alapján. Az így kigyűjtöttek közül a következők azok melyek mind a négy modellre azonosak: NOLE, DEP, LS, M2D, BB, a 6. jellemző minden modell esetében különböző. Érdekes megfigyelés, hogy a kezdeti egyértelmű VE jellemző hatékonyság után minden modell előnyösebbnek találja másik jellemzők kombinációját és majd csak leghamarabb 5 jellemző darabszámnál tér vissza ez a jellemző. Ezek alapján tehát átlagolás nélkül a legrelevánsabb geometriai jellemzők:

- A lokális szélsőértékek száma (NOLE)
- A legnagyobb vertikális, egybefüggő szakasz (DEP)
- Átlagos görbülsége a vonalnak (M2D)
- Diszlokáció túlnyúlás (LS)
- Körbezáró doboz (BB)

⁸A tanítási idő többek között erősen függ a tanuló adathalmaz méretétől

Továbbá ugyanezen ábrák alapján leolvasható, hogy a legtovább mellőzött jellemzők pedig a: EPAID, IAB. Mindkét jellemző – a (5.4. fejezet)-ben végzett analízis alapján – nem tűnt relevánsnak, tehát az előzetes elvárások igazolódtak.

Átlagolás mellett A tanulás teljesítménye hasonlóan, de az átlagolás nélkülihez képest kicsit hamarabb, már 4 jellemző darabszám mellett határozottan közel kerül a szaturációhoz, de az összeegyeztethetőség érdekében tekintsük szaturációnak a 6 jellemző darabszámot. Míg átlagolás nélküli esetben a VE jellemző, átlagolás mellett a DEP jellemző segítségével képesek a modellek sikeresen tanulni. Átlagolás esetében mind a 4 modell 2 jellemző darabszámig ugyanazon jellemzőket találják legkedvezőbbnek, majd továbbiakban is közel azonos jellemzőket találnak relevánsnak, mely alapján ezen jellemzők, modellek szerint univerzálisan működnek. A 6 jellemző darabszámnál leolvasható legrelevánsabb közös empirikus jellemzők a következők (6.5d. ábra):

- A legnagyobb vertikális, egybefüggő szaksz (DEP)
- Átlagos görbülsége a vonalnak (M2D)
- Diszlokáció túlnyúlás (LS)

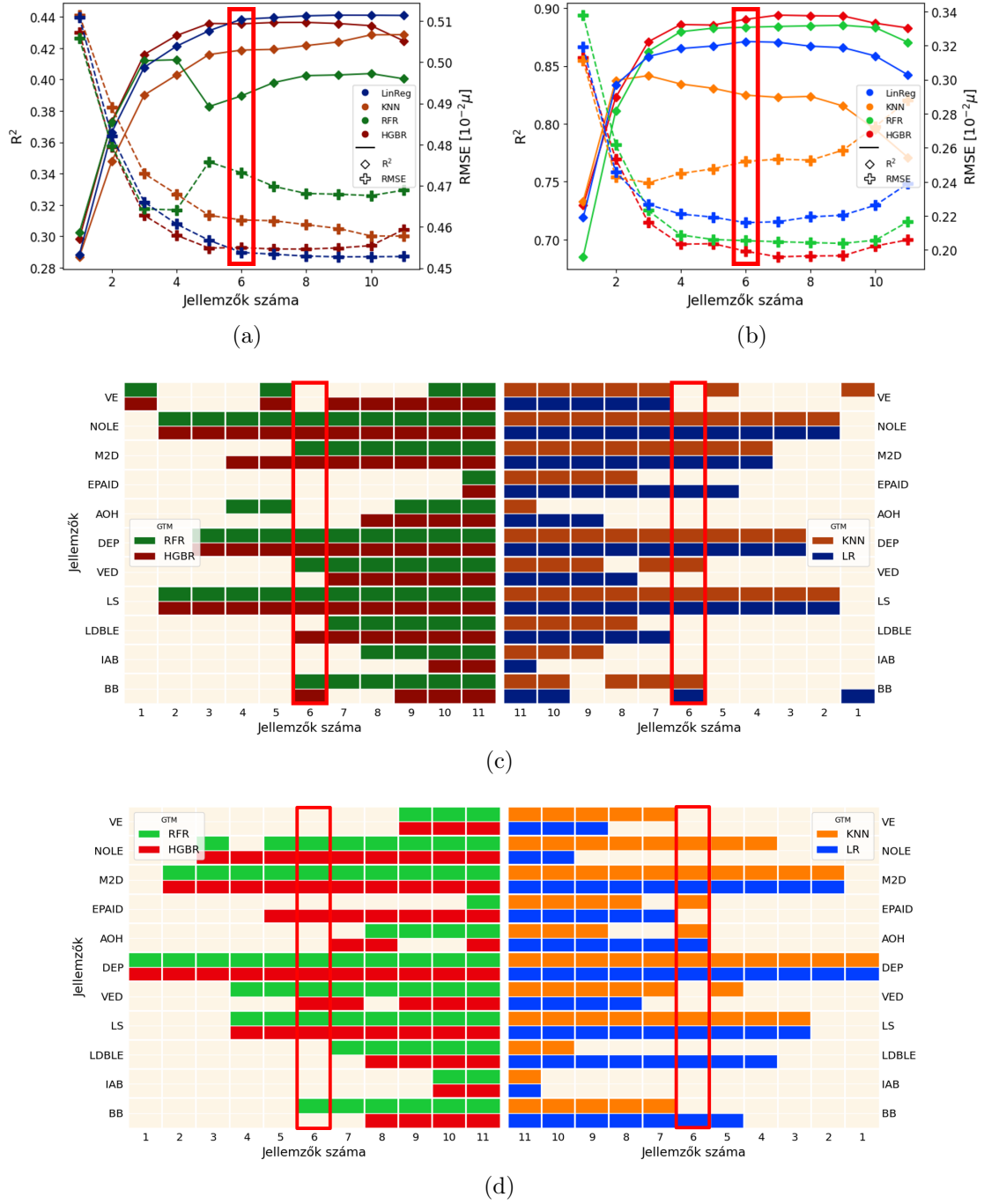
Az átlagolás és átlagolás nélküli analízisből azt láthatjuk, hogy modellválasztástól és átlagolástól függetlenül az M2D,LS és a DEP empirikus jellemzők jól működnek a diszlokációvonal jellemzésére.

6.2.2. Fourier-jellemzők

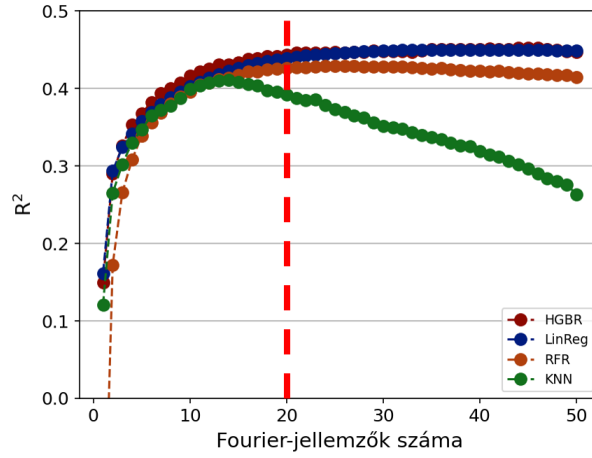
Ahogy az empirikus jellemzők esetében, úgy a Fourier-jellemzők esetében is teljes körű analízis az összes kombináció figyelembevétele volna, de mivel ez a (6.3) egyenlet következményeként ez rendkívül időigényes lenne, így a kombinációk egy részhalmazát vizsgálom csak meg, melynek számítása nagyságrendileg csökkenti a számítási igényt. Az algoritmus az összes $N_{\mathcal{F}}$, releváns Fourier jellemzővel indul, melyre természetesen meghatározza a teszt halmazra az R^2 teljesítmény értéket (ami egyetlen kiértékelő lépés). Ezt követően minden olyan kombinációt megvizsgál amikor csak egy jellemzőt veszünk ki az $N_{\mathcal{F}}$ halmazból, azaz ilyenkor $N_{\mathcal{F}} - 1$ jellemzőn tanítjuk a modellt $N_{\mathcal{F}}$ féle képen. A legjobban teljesítő kombinációnál kihagyott jellemzőt kivesszük a további kalkulációkból. A jellemzők egyesével történő eliminálását rekurzívan folytattuk egészen 1 jellemzőig. Ekkor ha aktuálisan n jellemzőnk volt, n -féle eliminációs lehetőségből választottunk, egészen addig, amíg már csak egy jellemző maradt. Így összesen:

$$C''_{\mathcal{F}} = 1 + \sum_{n=2}^{N_{\mathcal{F}}} n = \sum_{n=1}^{N_{\mathcal{F}}} n = \frac{N_{\mathcal{F}}(N_{\mathcal{F}} + 1)}{2} \quad (6.4)$$

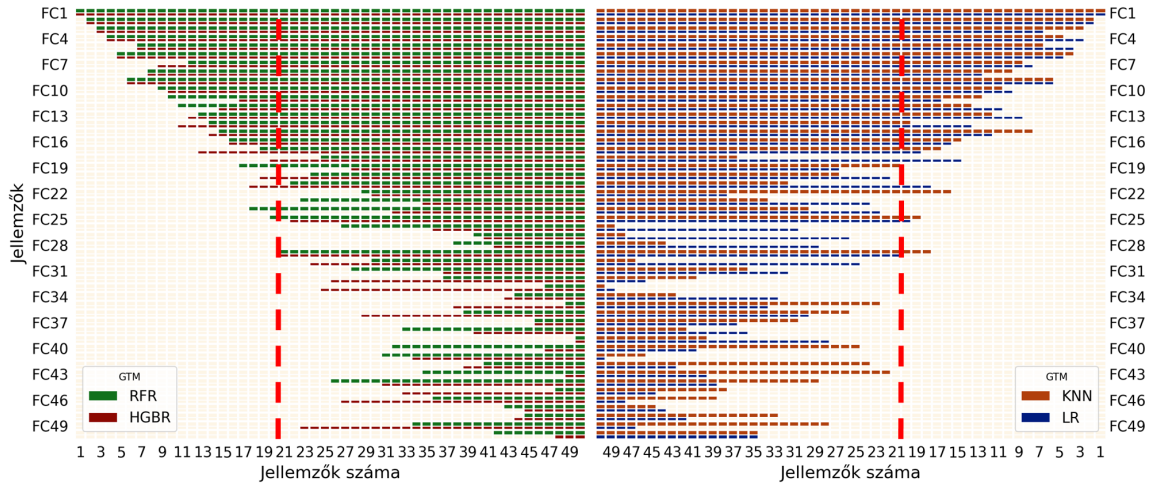
kombinációra kell elvégezni a tanulás és teszt folyamatát. Ez $L_x = 100b$ esetében $C''_{\mathcal{F}} = \frac{50 \cdot 51}{2} = 1275$ kombináció. A leglassabb modellel számolva ez már csak nagyságrendileg 1-2 órát vesz igénybe. Az analízis a $L_x = 100b$ rendszerméretre alkalmazva már fényt derít egyes Fourier jellemzőkre specifikus viselkedésre. Az analízis eredménye a 6.6. ábrán látható:



6.5. ábra. ($L_x = 100$) (a): Átlagolás nélkül végzett jellemző-kombinációk közül a legjobban teljesítők metrikáját mutatja a jellemző darabszám függvényében. (b): 100 egymást követő iteráció átlagolása mellett végzett jellemző-kombináció analízis (a)-val azonos reprezentációja. (c): Az (a) ábrán látható legjobb teljesítményt elérő jellemző kombinációk a jellemző darabszám függvényében. (d): Ugyanezen információ a (b)-n ábrázolt átlagolással elért jellemző-kombinációra értelmezve. A piros keretezések a teljesítmény szaturáció jellemző darabszám szerinti helyét mutatják.



(a)



(b)

6.6. ábra. ($L_x = 100b$) (a): Átlagolás nélkül, az összes Fourier-jellemzőn elvégzett redukciós algoritmussal elért legjobb teljesítmények a jellemzők számának függvényében. (b): Ugyanazon redukciós analízis eredménye, ahol a felhasznált Fourier-jellemzőket [azaz Fourier -komponenseket (Fourier Components - FC)] láthatjuk a jellemzők darabszámának függvényében. Itt FCm a $\frac{2\pi m}{L_x}$ hullámszámhoz tartozó együtthatót jelöli. A piros szaggatott vonal jelöli a teljesítmény szaturáció jellemző darabszám szerinti helyét.

A 6.6a. ábra alapján egyértelműen látszik, hogy a szolgáltatott jellemzők közül 20 már elegendő a szaturációkor elért optimális teljesítmény biztosításához. A használt modellek közül a KNN-en kívül mind sikeresen tanul a Fourier-jellemzők 20-as határértéken felüli jellemző darabszám esetében is. Ezen tanulságok alapján könnyen értelmezhető a 6.6b. ábra tartalma. A 20 jellemző darabszámig tekintve kétség kívül kirajzolódik, hogy a Fourier-jellemzők, azaz a Fourier-komponensek közül mind a kis hullámszámhoz tartozóak a relevánsak. Ez a tendencia a 20 jellemző darabszámon túlra is kiterjed, de ott már nem rajzolódik ki olyan kristálytisztán. A következtetések mind összeegyeztethető a (5.4. fejezet)-ben leírtakkal. A két ábrát (6.6a, 6.6b) összevetve azt mondhatjuk, hogy a GTM-ek tanításához és azzal való jósláshoz elegendő az első 20 Fourier-komponenst

alkalmazni jellemzőként, $L_x = 100b$ rendszerméret esetén. A rendszerméret és a releváns Fourier-komponensek száma között lineáris kapcsolatot feltételezve, azt mondhatjuk, hogy a releváns Fourier-jellemzők száma körülbelül a $J_{\text{rel}} = \frac{1}{5} \cdot \frac{L_x}{b}$ egészrészze.

7. Eredmények összefoglalása és továbblépési lehetőségek

Eredmények összefoglalása A dolgozatban nagyentrópiás ötvözeteket belső feszültségterének szórásának predikcióját tűztük ki célul. A predikcióhoz a Mesterséges Intelligencia gépi tanulási módszereit alkalmaztuk: Lineáris regresszió, K-legközelebbi szomszéd módszer, Véletlen Erdő regresszor és Hisztogram Gradiens Gyorsító regresszor, melyek tanításához nagy mennyiségű adat szükséges. Ennek biztosítása érdekében a nagyentrópiás ötvözetekre specifikus (random dinamikájú) szimulátorral, több szimulációs rendszerméretre $L_y = 500b$, $L_x = [50b, 100b, 150b]$ megfelelő belső feszültségtérrel rendelkező szimulációkat hajtottunk végre. Az eredmény diszlokációvonalakból két fajta (empirikus/geometriai, Fourier) vonalreprezentációval tabuláris formátumba alakítottuk az adathalmazt. Az adathalmazon átfogó keresztvalidációs analízist végezve (6.4. ábra) az alábbi fő következtetéseket tudjuk levonni:

- **Egymást követő adatpontokon keresztül végzett átlagolás nagyságrendileg növeli a modell-predikciók teljesítményét.**
- Az empirikus és a Fourier-jellemzők külön alkalmazása egyaránt alkalmas a belső feszültségtér szórásának prediktálásra, valamint a jellemzők kombinációja további predikciós teljesítménynövekedéssel bír.
- A szimuláció rendszerméret növelésével univerzálisan javul a predikciók teljesítménye.
- A Fourier-jellemzők alkalmazásakor univerzálisan a kis hullámszámokhoz tartozó Fourier-komponensek a relevánsak.
- Az empirikus jellemzők közül a diszlokációvonal görbületét jellemző M2D, a diszlokációvonal egybefüggő legnagyobb vertikális szakasza, és a diszlokáció vonal túlnyúlás a legmeghatározóbb keééemzők. legmeghatározóbb jellemző.

A szimulációkon átlagolás nélkül elért legjobb predikciós teljesítményt a kombinált jellemzőkkel érte el, melynek értéke $R_{\text{n.á.}} \simeq 0.55$, míg átlagolással elért legjobb predikciós teljesítmény szintén a kombinált jellemzők alkalmazása mellett, minden GTM modellre azonosan $R_{\text{á.}}^2 \simeq 0.9$.

Továbblépési lehetőségek Az eddigi kutatásunkhoz alkalmazott normális eloszlású belső feszültségtér is alkalmas a nagyentrópiás ötvözetek modellezésére, azonban a [23] cikkben többkomponensű ötvözetre bemutatott térbeli korrelációk jobban tükrözik ezen ötvözetek belső terét. Ennek okán a jövőben hasonló korrelációval rendelkező terek szimulációinak alkalmazása indokolt.

A nagyentrópiás ötvözetek belső szerkezetének feltérképezése a mai napig kutatott, így a GTM-ek egy általánosabb eloszlású belső feszültségtéren való tanítása, kísérleti felvételen való alkalmazásakor addig nem látott eltérést mutathat ki a normális eloszláshoz képest. Ilyen céllal alkalmas eloszlásnak lehet az általánosított normális eloszlás:

$$P(\tau_{\text{pin}}, \Sigma_{\text{pin}}, \beta) = \frac{\beta}{2\Sigma_{\text{pin}}\Gamma(1/\beta)} e^{-\left(\frac{\tau_{\text{pin}}}{\Sigma_{\text{pin}}}\right)^\beta}. \quad (7.1)$$

A nagyentrópiás ötvözetek belső feszültségtérének karakterizálását érdemes lehet a mesterséges intelligencia neurális hálókra alapuló módszereivel végezni. A dolgozat terjedelme alatt kidolgoztuk az „klasszikus” gépi tanulási módszerek ezen egyváltozós problémára vonatkoztatott alkalmazását –mellyel a magabiztos predikciót tudtunk elérni–, de lehetséges lehet a probléma kiterjesztése neurális hálók használatára. Az adattudományban kiemelkedően magas teljesítményre képes neurális hálók nagy előnye a rugalmas bemeneti adatformátum választása. A diszlokációvonalak individuális tanulmányozása helyett a szimulációs tér diszlokációvonal-mintázatát két dimenziós képként lehetne megadni a konvolúciós neurális hálóknak, amely a belső feszültségtér ismeretében képes lehet annak predikciójára, ehhez hasonló komplexitású problémára már találunk példát[24]. Távlati cél emellett módszerünk alkalmazása valós kísérleti felvételekre, és ezzel tényleges nagyentrópiás ötvözetek feszültségtérére történő következtetés.

Hivatkozások

- [1] J-W Yeh, S-K Chen, S-J Lin, J-Y Gan, T-S Chin, T-T Shun, C-H Tsau, and S-Y Chang. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced engineering materials*, 6(5):299–303, 2004.
- [2] Oleg N Senkov, Daniel B Miracle, Kevin J Chaput, and Jean-Philippe Couzinie. Development and exploration of refractory high entropy alloys—a review. *Journal of materials research*, 33(19):3092–3128, 2018.
- [3] Yong Zhang. *High entropy materials*, volume 1498. Springer, 2023.
- [4] Chen Zhang, Hengxu Song, Daniela Oliveros, Anna Fraczkiewicz, Marc Legros, and Stefan Sandfeld. Data-mining of in-situ tem experiments: On the dynamics of dislocations in cocrfemnni alloys. *Acta materialia*, 241:118394, 2022.
- [5] Pierre-Antoine Geslin and David Rodney. Microelasticity model of random alloys. part i: mean square displacements and stresses. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 153:104479, 2021.
- [6] D.Hull and D.J.Bacon. *Introduction to dislocations, fifth edition*. Elsevier Ltd., The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford, OX5 1GB, 2011.
- [7] William D Callister Jr and David G Rethwisch. *Materials science and engineering: an introduction*. John wiley & sons, 2020.
- [8] Vito Volterra. Sur l’équilibre des corps élastiques multiplement connexes. In *Annales scientifiques de l’École normale supérieure*, volume 24, pages 401–517, 1907.
- [9] Brain Cantor, ITH Chang, Peter Knight, and AJB Vincent. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 375:213–218, 2004.
- [10] Qingqing Ding, Yin Zhang, Xiao Chen, Xiaoqian Fu, Dengke Chen, Sijing Chen, Lin Gu, Fei Wei, Hongbin Bei, Yanfei Gao, et al. Tuning element distribution, structure and properties by composition in high-entropy alloys. *Nature*, 574(7777):223–227, 2019.
- [11] VF Gorban’, NA Krapivka, and SA Firstov. High-entropy alloys: Interrelations between electron concentration, phase composition, lattice parameter, and properties. *Physics of Metals and Metallography*, 118:970–981, 2017.
- [12] ON Senkov, GB Wilks, DB Miracle, CP Chuang, and PK Liaw. Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics*, 18(9):1758–1765, 2010.
- [13] David Rodney, Pierre-Antoine Geslin, Sylvain Patinet, Vincent Démery, and Alberto Rosso. Does the larkin length exist? *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 32(3):035007, 2024.

- [14] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot, and É. Duchesnay. Scikit-learn: Machine learning in python. *Journal of Machine Learning Research*, 12:2825–2830, 2011.
- [15] Gilles Louppe. Understanding random forests: From theory to practice. *arXiv pre-print arXiv:1407.7502*, 2014.
- [16] Jerome H Friedman. Stochastic gradient boosting. *Computational statistics & data analysis*, 38(4):367–378, 2002.
- [17] Weizhang Liang, Suizhi Luo, Guoyan Zhao, and Hao Wu. Predicting hard rock pillar stability using gbdt, xgboost, and lightgbm algorithms. *Mathematics*, 8(5):765, 2020.
- [18] Stefano Zapperi and Michael Zaiser. Depinning of a dislocation: the influence of long-range interactions. *Materials Science and Engineering: A*, 309:348–351, 2001.
- [19] Péter Dusán Ispánovity Dénes Berta. Dislocation depinning simulator. <https://github.com/bertadns/DDS/tree/main>, 2024. Version 1.0.
- [20] Hengxu Song, Binh Duong Nguyen, Kishan Govind, Dénes Berta, Péter Dusán Ispánovity, Marc Legros, and Stefan Sandfeld. Enabling quantitative analysis of in situ tem experiments: A high-throughput, deep learning-based approach tailored to the dynamics of dislocations. *Acta Materialia*, 282:120455, 2025.
- [21] Norihiko L Okamoto, Shu Fujimoto, Yuki Kambara, Marino Kawamura, Zhenghao MT Chen, Hirotaka Matsunoshita, Katsushi Tanaka, Haruyuki Inui, and Easo P George. Size effect, critical resolved shear stress, stacking fault energy, and solid solution strengthening in the crmnfecon high-entropy alloy. *Scientific reports*, 6(1):35863, 2016.
- [22] Claude Elwood Shannon. Communication in the presence of noise. *Proceedings of the IRE*, 37(1):10–21, 1949.
- [23] Ali Rida, Enrique Martinez, David Rodney, and Pierre-Antoine Geslin. Influence of stress correlations on dislocation glide in random alloys. *Physical Review Materials*, 6(3):033605, 2022.
- [24] Matthew Tancik, Pratul Srinivasan, Ben Mildenhall, Sara Fridovich-Keil, Nithin Raghavan, Utkarsh Singhal, Ravi Ramamoorthi, Jonathan Barron, and Ren Ng. Fourier features let networks learn high frequency functions in low dimensional domains. *Advances in neural information processing systems*, 33:7537–7547, 2020.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani Berta Dénesnek és Dr. Ispánovity Péternek a szimulációk elvégzésében nyújtott útmutatásukért és segítségükért, a gépi tanulási módszerek helyes alkalmazásában adott támogatásukért, valamint az eredmények kiértékeléséhez nyújtott számtalan segítségükért és türelmükért. Külön hálás vagyok a sok átadott tudásért, amely hozzájárult szakmai fejlődésemmhez és munkám sikeres megvalósításához.